

Quantitative rastertunnelmikroskopische Untersuchungen akustischer Oberflächenwellenfelder auf der Nanometerskala

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)
im Fach Physik

eingereicht an der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I
Humboldt-Universität zu Berlin

von
Dipl.-Phys. Peter Voigt
geboren am 04.01.1970 in Berlin

Präsident der Humboldt-Universität zu Berlin:
Prof. Dr. J. Mlynek

Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I:
Prof. Dr. B. Ronacher

Gutachter:

1. Prof. Dr. K. H. Ploog
2. Prof. Dr. H. Niehus
3. Prof. Dr. M. Reichling

eingereicht am:	6. Februar 2002
Tag der mündlichen Prüfung:	19. Juni 2002

Abstract

This thesis deals with the SAW-STM method, which is a technique based on scanning tunneling microscopy (STM) for the high-resolution mapping of surface acoustic waves (SAW). The measurement principle of the SAW-STM utilizes the modulation of the tunneling distance and the resulting modulation of the tunneling current due to the mechanic oscillation of the sample surface. To facilitate signal detection a heterodyn technique is employed which shifts the measured signal into the kHz-range by adding modulation to the tunneling voltage. The signal contains the entire information about the amplitude and the phase of the SAW-induced tunneling distance modulation. Experiments are presented to investigate the dependence of the signal amplitude on the experimental parameters and on the sample topography. This data is compared to a theory developed to describe the SAW-STM signal, leading to a calibrated measurement of the trajectory of the sample surface which carries the wave. The sample we investigated was a 40 nm gold film deposited on a LiNbO_3 substrate in the Y-cut, deformed by a Rayleigh-type wave in the z-direction.

To increase signal stability and to extend the range of reactive sample materials we constructed a SAW-STM operating in the ultra-high-vacuum (UHV). In this thesis the conversion of a commercial STM to a SAW-STM is described. A sample holder is constructed, which allows the transfer of the sample between the evaporation stage and the STM without venting the UHV chamber. It provides a contact spring mechanism for the automatical electric contactation of the sample chip, when the sample holder is inserted into the STM. Moreover, we installed a UHV-compatible wiring system for SAW-excitation and for signal detecting and an evaporation stage for in-situ sample preparation. We demonstrate that the UHV-SAW-STM is capable of exiting and detecting surface acoustic waves with an amplitude in the range 0.001 Å to 1 Å. The maximal frequency of SAW which can be studied with the UHV-SAW-STM is found to be at least 360 MHz. For the analysis of SAW-STM data a LabVIEW software package was implemented.

To put the SAW-STM technique on a strong basis, we systematically studies the dependence of the SAW-STM signal on the various measurement parameters. The theory of the SAW-STM signal developed in this work is in good agreement with this experimental data. In this theory, we take into account that the STM is operated in the constant-current mode, i.e. the tip position is controlled to keep the average tunneling current constant. The comparison of the measured and the simulated dependence of the signal amplitude on the amplitude of the tunneling distance modulation allows the calibrated measurement of the vertical displacement amplitude of the Rayleigh wave.

SAW-STM scans yield images of the topography and of the amplitude and the phase of the SAW-STM signal. Employing the theory of the SAW-STM signal on the corrugated surface, we simulated amplitude and phase images based on the measured topography. The agreement between simulated and measured amplitude images is only qualitative. In contrast, the comparison of simulated and measured phase images allows the determination of the excentricity of the oscillation ellipse. Having determined this excentricity and the vertical displacement amplitude of the Rayleigh wave, we have gained complete knowledge about the geometry of the Rayleigh wave oscillation ellipse.

Keywords:

scanning tunneling microscopy, surface acoustic wave, oscillation ellipse, SAW-STM

Zusammenfassung

Diese Arbeit befaßt sich mit der SAW-STM-Methode, einer Abwandlung der Rastertunnelmikroskopie (STM¹) zur hochauflösenden Abbildung akustischer Oberflächenwellen (SAW²). Das Meßprinzip des SAW-STM beruht auf der Modulation des Tunnelabstandes und der hieraus resultierenden Modulation des Tunnelstroms durch die oszillatorische Bewegung der Probenoberfläche. Zur einfacheren Signaldetektion wird ein Heterodyn-Verfahren verwendet, das über eine zusätzliche Modulation der Tunnelspannung das SAW-STM Signal in den kHz-Frequenzbereich verschiebt. Dieses trägt die komplette Information über die Amplitude und die Phase der Tunnelabstandsmodulation. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Abhängigkeit des SAW-STM Signals von den experimentellen Parametern und von der Topographie der Probe theoretisch beschrieben und experimentell untersucht. Dies führt zu einer kalibrierten Vermessung der oszillatorischen Bewegungsbahn der SAW-tragenden Probenoberfläche. Das untersuchte Materialsystem ist ein 40 nm dicker Goldfilm auf einem LiNbO₃-Substrat im Y-Schnitt, das eine Welle vom Rayleigh-Typ in Z-Richtung trägt.

Indem ein SAW-STM entwickelt wird, das im Ultrahochvakuum (UHV) arbeitet, wird die SAW-STM Methode hinsichtlich des Spektrums untersuchbarer reaktiver Materialien und hinsichtlich der Signalstabilität. Es wird der Umbau eines kommerziellen Rastertunnelmikroskops zum SAW-STM beschrieben. Zu diesem Zweck wird eine Probenhalterung konstruiert, die den Transfer der Probe zwischen der Bedampfungseinrichtung und dem STM ohne Belüftung der Kammer erlaubt. Gleichzeitig stellt sie automatisch die fünf notwendigen elektrischen Kontakte zum Probenchip her, wenn die Probenhalterung in das STM gesetzt wird. Weiterhin werden die Konstruktion eines UHV-tauglichen Systems von Hochfrequenz-Signalleitungen und der Bedampfungseinrichtung zur in-situ Probenpräparation beschrieben. Mit diesem UHV-SAW-STM können SAWs einer Amplitude im Bereich von 0.001 Å bis 1 Å angeregt und detektiert werden. Die maximale Frequenz, die eine im UHV-SAW-STM nachweisbare SAW haben kann, beträgt mindestens 360 MHz. Weiterhin wird das in LabVIEW geschriebene Softwarepaket zur Auswertung der SAW-STM-Daten vorgestellt.

Um die SAW-STM-Methode auf ein sicheres Fundament zu stellen, wurde erstmals systematisch die Abhängigkeit des SAW-STM-Signals von den Meßparametern experimentell untersucht. Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Theorie des SAW-STM-Signals beschreibt die experimentell gefundenen Abhängigkeiten hinreichend gut. Zentraler Punkt dieser Theorie ist dabei die Berücksichtigung der Abstandsregelung des STM, die im Constant-Current-Modus

¹engl. scanning tunneling microscopy

²engl. surface acoustic wave

die Spitzenposition so regelt, daß der mittlere Tunnelstrom konstant ist. Der Vergleich der gemessenen und der theoretischen Abhängigkeit der Signalamplitude von der Amplitude der Modulation des Tunnelabstandes ermöglicht dabei die kalibrierte Messung der Amplitude der vertikale Auslenkung der Rayleighwelle.

Scans der SAW-STM-Methode liefern Bilder der Topographie sowie der Amplitude und der Phase des SAW-STM-Signals. Mit der Theorie des SAW-STM-Signal der korrigierten Probenoberfläche werden aus der gemessenen Topographie simulierte Amplituden- und Phasebilder erstellt und mit den gemessenen Bildern verglichen. Während die Übereinstimmung mit den gemessenen Amplitudenbildern nur qualitativer Art ist, erlaubt der quantitative Vergleich zwischen simulierten und gemessenen Phasenbildern die Bestimmung der Exzentrizität der Oszillationsellipse. Zusammen mit der oben erläuterten Messung der vertikalen Auslenkungsamplitude ist somit in dieser Arbeit die Oszillationsellipse der Rayleighwelle vollständig ausgemessen.

Schlagwörter:

Rastertunnelmikroskopie, Akustische Oberflächenwelle, Oszillationsellipse, SAW-STM

Danksagung

Zu Beginn möchte ich all denen meinen Dank auszusprechen, die durch ihre Unterstützung ganz wesentlich zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben. Mein besonderer Dank gilt ...

...Prof. Dr. K. H. Ploog für die Aufnahme am Paul-Drude-Institut und seine stete Unterstützung meiner Arbeit.

...Dr. R. Koch, der diese Arbeit betreute, mich in die UHV-Technik einwies und mir nicht nur in experimentell schwierigen Phasen mit seiner Erfahrung und Hilfsbereitschaft stets zu Seite stand.

...Dr. H.-J. Fröhlich für die Aufnahme in der Abteilung Nanoakustik und für viele fruchtbare Diskussionen.

...S. Krauß, die mich mit vielen guten Ideen und besonderem feinmotorischen Geschick im Labor unterstützte und damit einen wichtigen Beitrag zum Aufbau der UHV-Anlage und des SAW-STM lieferte.

...H. Gallowski für die Zusammenarbeit bei der Entwicklung der Ausheizsteuerung und für seine Bereitschaft, elektronische Probleme nicht nur zu lösen sondern auch die elektrotechnischen Hintergründe mit großer Geduld verständlich zu machen.

...Dr. E. Chilla, Dr. T. Hesjedal, Dr. C. Flannery und Dr. F. Jungnickel für viele fachliche Diskussionen und ihre Unterstützung.

...Dr. T.-S. Yang, die ihre Erfahrung auf dem Gebiet der Rastertunnelmikroskopie bei der Kalibrierung des STM einbrachte.

...K. Hauck und W. Seidel für die Herstellung der Probenchips.

...P. Schützendübe, der uns in die Benutzung seiner Apparatur zur Präparation der STM-Spitzen einwies.

...J. Schönberg, der für ein reibungsloses Funktionieren der Rechentechnik sorgte.

...Ch. Schoder et al. für das unermüdliche Korrekturlesen.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	4
2	Akustische Oberflächenwellen in der Theorie	8
2.1	Wellengleichungen, elastische Konstanten	8
2.2	Die Rayleighwelle	10
2.3	Weitere Arten akustischer Oberflächenwellen	12
3	Akustische Oberflächenwellen im Experiment	14
3.1	Der Interdigitalwandler	14
3.2	Weitere Methoden zur Erzeugung von SAWs	16
3.3	Methoden zur Detektion von SAWs	17
4	Theoretische Grundlagen	22
4.1	Ein Überblick über die Theorien der Rastertunnelmikroskopie	22
4.1.1	Tunneln durch ein eindimensionales Rechteckpotential	23
4.1.2	Die Tunnelcharakteristik nach Simmons	24
4.1.3	Die Theorie des Tunnelns nach Tersoff und Hamann	26
4.2	Das SAW-STM-Experiment	30
4.2.1	Das Meßprinzip des SAW-STM – Diskussion möglicher Alternativen . . .	30
4.2.2	Das SAW-STM-Signal im Constant-Height-Modus	33
4.2.3	Das SAW-STM-Signal im Constant-Current-Modus — Die Theorie	37
4.3	Das SAW-STM-Signal auf der korrigierten Oberfläche	48
4.3.1	Das SAW-STM-Signal als Funktion der Oszillationsbahn und der Oberflächenneigung	48
4.3.2	Die geometrische Anschauung der Phase im Falle einer Rayleighwelle . .	52
4.3.3	Diskussion der Phase als Funktion der Oberflächenneigung und des Ellipsenwinkels	53
4.3.4	Diskussion der Amplitude der Abstandsmodulation als Funktion der Oberflächenneigung und des Ellipsenwinkels für die Rayleighwelle . . .	56
4.4	Der quantitative Vergleich gemessener und simulierter SAW-STM-Bilder	60
4.4.1	Die Definition des Phasenkorrelationsfehlers	60
4.4.2	Die Definition des Amplitudenkorrelationsfehlers	62

5	Software	65
5.1	Das Konzept der graphischen Programmierung unter LabVIEW	65
5.2	Das Hauptprogramm "SAW-Viewer"	66
5.3	Die Simulation von Amplituden- und Phasenbildern	71
5.4	Die Bestimmung des Ellipsenwinkels	72
5.5	Die Auswertung atomarer Topographien	73
6	Experimenteller Aufbau	76
6.1	Die UHV-Anlage, Probenmanipulation	76
6.2	Das Pumpensystem	77
6.3	Das Ausheizen der Kammer	78
6.4	Die Präparation der Schichten	82
6.4.1	Der Elektronenstrahlverdampfer	83
6.4.2	Die Bedampfungseinrichtung	83
6.4.3	Der Probenchip	85
6.5	Das SAW-STM	86
6.5.1	Das Omicron-STM und die Zielsetzung des Umbaus zum SAW-STM . . .	86
6.5.2	Die mobile Kontaktierung der Probe	88
6.5.3	Die Übertragung der Hochfrequenz-Signale	90
6.5.4	Die Installation der Hochfrequenz-Leitungen	90
7	Experimentelle Resultate	93
7.1	Die Kalibrierung des Rastertunnelmikroskops	93
7.1.1	Die Kalibrierung des lateralen Maßstabes	93
7.1.2	Die Kalibrierung des vertikalen Maßstabes	94
7.2	Die Leistungsmerkmale des UHV-SAW-STM	96
7.2.1	Der Einfluß von Reflexionen auf das SAW-STM-Signal	96
7.2.2	Die Dynamik des UHV-SAW-STM	99
7.2.3	Die Bandbreite des UHV-SAW-STM	101
7.3	Das SAW-STM-Signal im Constant-Current-Modus — Experimentelle Überprü- fung	103
7.3.1	Die Absolutkalibrierung der Amplitude der Abstandsmodulation	103
7.3.2	Die Abhängigkeit der Amplitude vom Tunnelstrom	108

7.3.3	Die Abhängigkeit der Amplitude von der Tunnelspannung und ihrer Modulation	110
7.4	Das UHV-SAW-STM im Scanbetrieb	113
7.4.1	Die experimentelle Bestimmung der Exzentrizität der Oszillationsellipse .	113
7.4.2	Der Einfluß der Wellenausbreitungsrichtung auf die Phase des SAW-STM-Signals	119
7.4.3	Die Abbildung monoatomarer Stufen mit den UHV-SAW-STM	121
7.4.4	Die Simulation der Amplitude des SAW-STM-Signals	122
8	Zusammenfassung und Ausblick	126
	Literaturverzeichnis	135
A	Beweis zum Verhalten des Minimalabstandes bei großen Abstandsmodulationen	136
B	Algorithmus zur Kalibrierung des lateralen Maßstabes unter Berücksichtigung der Drift	139

1 Einleitung

Akustische Oberflächenwellen¹ sind in vielerlei Hinsicht wissenschaftlich und technologisch von großer Bedeutung. Sowohl die sich auf dem Meer ausbreitende Wasserwelle, die für die meisten Menschen die Vorstellung des physikalischen Phänomens Welle prägt, als auch Erdbebenwellen [1] sind Oberflächenwellen. Durch Explosionen erzeugte seismische Oberflächenwellen werden in der Geophysik zur Untersuchung bodennaher Strukturen verwendet [2]. Mit ihrer Nutzung zur Hochfrequenz-Signalbearbeitung in mikroelektronischen Schaltungen fanden SAWs ihr Hauptanwendungsgebiet. So kommen Oberflächenwellenbauelemente als Zwischenfilter in jedem Fernseher und jedem Mobiltelefon zum Einsatz und haben einen Gesamtmarkt, der auf über 1 Mrd. US-\$ geschätzt wird. Die Erzeugung und Charakterisierung akustischer Oberflächenwellen ist daher für die Weiterentwicklung dieser Bauelemente von großem Interesse. Auch wenn schon Lord Rayleigh [3] Ende des 19. Jahrhunderts mit der Untersuchung von SAWs begann, sind diese noch heute Gegenstand aktueller physikalischer Grundlagenforschung. Wegen ihrer Beschränkung auf die oberflächennahe Schicht des wellentragenden Mediums eignen sich akustische Oberflächenwellen hervorragend als Sonde für die Strukturuntersuchung dünner Filme. Die dabei wirksamen Wechselwirkungsmechanismen können elastischer, elektronischer oder magnetischer Natur sein. Als Beispiele seien hier die Abbildung von Kristalldefekten [4], der Transport von Spins durch SAWs [5] sowie die Kopplung von SAWs mit niederdimensionalen Ladungsträgersystemen [6] genannt.

Für die Abbildung akustischer Oberflächenwellen, die die Voraussetzung dieser Experimente an SAWs sind, steht eine Vielzahl von Methoden zur Verfügung. Sie beruhen zumeist auf der Wechselwirkung fokussierter Laser-, Röntgen-, oder Elektronenstrahlen [7] mit der wellenführenden Oberfläche. Bei licht-optischen Methoden werden dabei Effekte wie die Beugung [8], die Modulation des optischen Weges (Interferometrie [8]), die Ablenkung der Reflexionsrichtung [9], und die Modulation der Reflektivität oder ihrer Anisotropie [10] genutzt. Die Auflösung dieser Methoden ist jedoch durch die minimale Fokusgröße bestimmt und liegt somit nicht wesentlich unter 1 μm . Mit dem Trend zu immer höheren Frequenzen in der Signalübertragung erreichen heute übliche Oberflächenwellenbauelemente Arbeitsfrequenzen im GHz-Bereich [11, 12]. Da die resultierende akustische Wellenlänge somit im Submikrometerbereich liegt, sind optische Methoden zur Charakterisierung dieser Bauelemente ungeeignet. Für die Untersuchung von Nanostrukturen, wie etwa ultradünnen Filmen und Quantenpunkten, ist gar eine Auflösung im Nanometerbereich erforderlich.

Zur Abbildung von Strukturen im realen Raum, die unterhalb der optischen Auflösungsgrenze liegen, stehen heute die unterschiedlichen Methoden der Rastersondenmikroskopie zur Verfügung. Die wohl bekannteste ist die von Binnig und Rohrer entwickelte Rastertunnelmikroskopie [13], die mit ihrem unübertroffenen Auflösungsvermögen die Abbildung atom-

¹engl. surface acoustic wave, SAW

arer Strukturen ermöglichte [14]. Das Prinzip des Rastertunnelmikroskops (STM²) basiert auf der Abhängigkeit des Tunnelstromes zwischen einer feinen Spitze und der Probe vom Tunnelabstand. Die Spitze rastert die Probenoberfläche ab und wird piezoelektrisch so geführt, daß der Tunnelstrom und damit der Abstand zwischen der Spitze und dem ihr am nächsten gelegenen Ort der Probe konstant bleibt. Die Beschränkung der Rastertunnelmikroskopie auf elektrisch leitende Proben zog die Entwicklung des Rasterkraftmikroskops [15] (AFM, engl. atomic force microscope) nach sich. Es beruht auf der Kraftwechselwirkung zwischen der Probenoberfläche und einer an einem Federbalken befestigten Spitze, die bei Abständen weniger Nanometer wirken. Auch wenn in einzelnen Fällen atomare Strukturen mit dem AFM abgebildet werden konnten, ist das STM wegen des scharf lokalisierten Pfades des Tunnelstromes dem AFM in der Auflösung überlegen. Das Prinzip, mit einer Sonde eine Oberfläche abzurastern und dabei Informationen über die Probe zu gewinnen, ist die Grundlage aller Rastersondenmikroskope. Die dabei verwendete Wechselwirkungen zwischen Sonde und Probe können z.B. die Reibung (Lateralkraftmikroskopie [16]), der Magnetismus [17], die Wärmeleitung [18] und die elektrostatische Anziehung [19] sein.

Der vorliegenden Arbeit liegt die Idee zugrunde, das beispiellose Auflösungsvermögen der Rastertunnelmikroskopie für die Abbildung akustischer Oberflächenwellen zu verwenden [20]. Abraham et al. [21, 22] nutzten eine durch Vibration der Spitze herbeigeführte Modulation des Tunnelabstandes zur Rauschunterdrückung bei der Abbildung der Oberflächentopographie. Die rastertunnelmikroskopische Untersuchung an SAWs wird entscheidend durch die Tatsache erschwert, daß übliche SAW-Frequenzen im MHz- und im unteren GHz-Bereich liegen und sich somit weit außerhalb der Bandbreite des STM befinden. Wie jedoch Strozewski et al. [23] nachwiesen, hat wegen der nichtlinearen Abstandscharakteristik des Tunnelübergangs die wellenbedingte Abstandsmodulation einen Einfluß auf den Tunnelstrom. Mit dem auf der Grundlage dieses Prinzips arbeitenden akustischen Tunnelmikroskop (engl. tunneling acoustic microscope) gelang es Takata et al. [24], elastische Spannungsfelder des Substrats sichtbar zu machen. Daß die Aussagefähigkeit der akustischen Tunnelmikroskopie über rein qualitative Abbildungen hinausgeht, demonstrierte Heil [25]: Er wies die Abhängigkeit des Bildkontrasts von der Wellenamplitude nach und bestimmt somit die longitudinale Partikelverschiebung einer akustischen Oberflächenwelle in absoluter Kalibrierung. Auch wenn die Messung einer einzelnen Auslenkungskomponente auf der atomaren Skala ein beeindruckendes Resultat der akustischen Tunnelmikroskopie war, ist diese Methode blind gegenüber der Phase der SAW. Um auch die Phase von Oberflächenwellenfeldern sichtbar zu machen, wurde am Paul-Drude-Institut die akustische Rasterkraftmikroskopie (SAFM, engl. scanning acoustic force microscopy) entwickelt. Sie gestattet es, mit einer Auflösung im Nanometerbereich Wellenfelder phasensensitiv abzubilden, und gibt somit Auskunft über die Geschwindigkeit und Ausbreitungsrichtung akustischer Oberflächenwellen [26, 27]. Die Auflösung der SAFM-Technik ist für die Abbildung atomarer Strukturen jedoch unzureichend. Die akustische Tunnelmikroskopie und die SAFM-Technik haben darüber hinaus den Nachteil, daß nur die ver-

²engl. scanning tunneling microscope

tikale bzw. nur die longitudinale Auslenungskomponente der SAW erfaßt werden kann. Erst wenn alle zwei bzw. drei Auslenungskomponenten einer akustischen Welle bekannt sind, können mathematische Beziehungen zu den elastischen Konstanten aufgestellt werden.

Das SAW-STM (engl. surface acoustic wave scanning tunneling microscope), mit dem sich die vorliegende Arbeit beschäftigt, schließt diese Lücke im Spektrum der genannten Methoden zur Untersuchung akustischer Oberflächenwellen: Zum einen ermöglicht es die phasensensitive Abbildung von Wellenfeldern mit einer Auflösung bis hin zu atomaren Strukturen [28]; zum anderen können, wie diese Arbeit zeigen wird, sowohl die longitudinale als auch die vertikale Auslenungskomponente von SAWs ausgemessen werden. Mit dem SAW-STM läßt sich daher die Trajektorie, auf der sich Oberflächenelemente aufgrund der SAW bewegen, in absoluter Kalibrierung ausmessen. Diese Eigenschaft ist nach unserem Wissen unter den Rastersondenmethoden einzigartig.

Wie auch das SAFM wurde die SAW-STM-Methode am Paul-Drude-Institut entwickelt [29, 30]. Mit den SAW-Rastertunnelmikroskopen der ersten Generation gelang es, daß Meßprinzip zu demonstrieren und die quantitative Übereinstimmung der gemessenen Amplituden- und Phasenbilder der Oberflächenoszillation mit der theoretischen Erwartung nachzuweisen [31, 32]. Dies geschah bei einer SAW-Frequenz von 40 MHz. Da die Experimente an Luft durchgeführt wurden, war die Schwingungsisolierung nicht optimal, und es konnte als nicht-reaktives Material nur Gold untersucht werden. Auch beeinträchtigte der an Luft kaum vermeidbare Wasserfilm die Tunnelbedingungen. Trotz dieser Einschränkungen bewiesen Messungen [28], bei denen die atomare Gitterperiodizität in der Amplitude und in der Phase abgebildet wurden, das Potential der SAW-STM-Methode.

Diese Arbeit beginnt mit einer kurzen Einführung in die Theorie der akustischen Oberflächenwellen und speziell der Rayleighwelle (2. Kapitel). Ein Überblick über die experimentellen Methoden zur Erzeugung und zur Detektion von SAWs wird im 3. Kapitel gegeben. Das 4. Kapitel stellt die theoretischen Grundlagen der SAW-STM-Methode dar. Nach einer allgemeinen Einführung in die Theorie des Tunnelübergangs [33, 34] wird die von Fröhlich et. al [31] gefundene Theorie des SAW-STM-Signals im Constant-Height-Modus³ des STM vorgestellt. Auf dieser Grundlage wird eine Theorie entwickelt, die das SAW-STM-Signal im beim Experiment verwendeten Constant-Current-Modus⁴ des STM beschreibt. Anschließend wird das von Fröhlich et. al [35] gefundene Modell zur Erklärung des Kontrasts der Amplituden- und Phasenbilder erläutert und ergänzt. Dieses Modell ermöglicht die Simulation von SAW-STM-Bildern, die durch den im 4. Kapitel definierten Korrelationsfehler der Amplitude und der Phase quantitativ mit der Messung verglichen werden können.

Eine Voraussetzung für eine effiziente Untersuchung von SAWs mit dem SAW-STM ist eine Auswertungssoftware, die speziell auf die Anforderungen der SAW-STM-Methode zugeschnitten ist. Das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte umfassende Software-Paket wird im 5. Kapi-

³Konstanthöhenmodus, bei dem die Spitze in einem konstanten mittleren Abstand zur Probe gehalten wird.

⁴Konstantstrommodus. Der Spitzen-Probe-Abstand wird so geregelt, daß der Tunnelstrom konstant ist.

tel vorgestellt. Es umfaßt zusätzlich zu den in einer kommerziellen STM-Software üblichen Funktionen zur Betrachtung und Bearbeitung der Meßdaten auch SAW-STM-spezifische Funktionen, wie etwa die Simulation von Amplituden- und Phasenbildern und deren quantitativen Vergleich mit den Messungen. Erst diese Funktionen ermöglichen die Bestimmung der Auslenkungskomponenten der SAW.

Eines der Ziele dieser Arbeit besteht darin, ein im Ultrahochvakuum (UHV) arbeitendes SAW-Rastertunnelmikroskop zu entwickeln und somit die Stabilität des Meßsignals soweit zu verbessern, daß dieses quantitativ ausgewertet werden kann. Durch das Experimentieren im UHV entfällt der durch die Luft übertragende Schall, und die Probenoberflächen bleiben über lange Zeit sauber von Adsorbaten, die die Tunnelbedingungen beeinträchtigen. Da in Zukunft mit dem SAW-STM auch reaktive Metalle und epitaktischen Schichten untersucht werden sollen, ist die Präparation, Lagerung und rastertunnelmikroskopische Untersuchung unter UHV-Bedingungen sogar unabdingbar. Im 6. Kapitel wird beschrieben, wie ein kommerzielles, im UHV arbeitendes Rastertunnelmikroskop zum SAW-STM umgebaut wird. Eine erfolgreiche Inbetriebnahme verlangt die Lösung folgender Problemkreise: Die Probenkontaktierung muß so konstruiert sein, das der Probentransfer innerhalb der UHV-Anlage nicht von Kabeln behindert wird. Ferner gilt es, die Hochfrequenzsignale zur Wellenanregung verlustarm einzuspeisen. Schließlich muß eine vorhandene Vakuumkammer durch die Installation stärkerer Pumpen, den Einbau eines Elektronenstrahlverdampfers und die Entwicklung einer elektronischen Ausheizsteuerung zur leistungsfähigen UHV-Anlage umgerüstet werden, an der routinemäßig SAW-STM-Experimente durchgeführt werden können.

Den experimentellen Ergebnissen ist das 7. Kapitel gewidmet. Es wird die zur präzisen Vermessung der SAW-Auslenkungskomponenten notwendige Kalibrierung des Rastertunnelmikroskops vorgeführt. Hierbei kommt ein eigens entwickelter, im Anhang erklärter Kalibrierungsalgorithmus zur Anwendung, der gegenüber dem Einfluß der Drift unempfindlich ist. Die Frage, ob das UHV-SAW-STM die gestellten Erwartungen hinsichtlich der Bandbreite und der Sensitivität erfüllt, wird ebenfalls im 7. Kapitel beantwortet. Auch wird die Theorie des SAW-STM-Signals im Constant-Current-Modus einer experimentellen Prüfung unterzogen und zur Absolutkalibrierung der Wellenamplitude verwendet. Die Theorie des SAW-STM-Signals auf der korrigierten Oberfläche wird anhand gemessener Amplituden- und Phasenbilder überprüft. Hierbei steht der Vergleich mit simulierten Bildern im Vordergrund, der quantitative Aussagen über die Oszillationsbahn der Probenoberfläche verspricht.

2 Akustische Oberflächenwellen in der Theorie

Die theoretische Untersuchung akustischer Oberflächenwellen begann Ende des 19. Jahrhunderts mit den Arbeiten von Lord Rayleigh und A. Love. Rayleigh entdeckte im Rahmen der Elastizitätstheorie Wellenmoden, die sich auf einer ebenen Oberfläche eines unendlich ausgedehnten isotropen Festkörpers ausbreiten [3]. Das charakteristische Merkmal akustischer Oberflächenwellen ist das exponentielle Abklingen ihrer Amplitude mit der Tiefe im Festkörper. Daß die Energie der Welle daher an der Oberfläche des Ausbreitungsmediums konzentriert ist, ist der Grund für die zerstörerische Kraft der Erdbebenwellen. Gleichzeitig eignen sich SAWs gerade wegen dieser Lokalisierung für die Untersuchung von Festkörperoberflächen und von Dünnschichtsystemen. Die Frequenzen typischer in der Festkörperakustik untersuchter SAWs liegen im Bereich weniger MHz bis hin zu wenigen GHz. Die Physik der Oberflächenwellen zählt damit zum Gebiet des Ultraschalls. Allgemein definiert, existieren SAWs an Grenzflächen, bei denen ein festes Medium einem anderen festen Medium, einer Flüssigkeit, einem Gas oder dem Vakuum gegenübersteht. In piezoelektrischen Materialien ist die SAW von einem elektrischen Feld begleitet, das von der Polarisierung durch die lokale Verspannung des Mediums herrührt.

2.1 Wellengleichungen, elastische Konstanten

Im Rahmen der Elastizitätstheorie sind akustische Wellen Lösung der Wellengleichung, deren Herleitung im folgenden skizziert werden soll. Der Festkörper wird im kartesischen Koordinatensystem mit den Richtungen x_1 , x_2 und x_3 beschrieben, wobei die x_1 die Wellenausbreitungsrichtung und x_3 die Richtung der der Oberfläche wegzeigenden Oberflächennormale ist. Wirken auf den Festkörper Kräfte ein, erfährt dieser eine Verformung. Jedes infinitesimale Volumenelement, dessen Ruheposition \mathbf{r} ist, bewegt sich um den Verschiebungsvektor \mathbf{u} aus der Ruheposition. Ein Maß für die relative Verschiebung zweier benachbarter Volumenelemente, also für die Deformation, ist die Matrix $\partial u_i / \partial x_j$. Man kann zeigen, daß in der Elastizitätstheorie nur der symmetrische Anteil dieser Matrix eine Rolle spielt, weil der asymmetrische Anteil lokale Torsionen beschreiben, die nicht zu Wellen führen [36]. Dieser symmetrische Anteil

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (2.1)$$

wird als Deformationstensor bezeichnet. Die im Festkörper wirkenden Kräfte werden durch den Spannungstensor \tilde{T} beschrieben. Seiner Definition liegt die Vorstellung zugrunde, daß jedes Volumenelement die Gestalt eines Würfels hat. Auf die Seite des Würfels, deren Oberflächennormal in x_j -Richtung zeigt, wirkt dann der Kraftvektor (T_{1j}, T_{2j}, T_{3j}) . Es läßt sich beweisen, daß der Spannungstensor \tilde{T} ebenfalls symmetrisch ist. Die sich bei einer Verformung

aufbauende Spannung wird im elastischen Medium durch das Hookesche Gesetz beschrieben

$$T_{ij} = c_{ijkl} S_{kl} \quad , \quad (2.2)$$

wobei nach der Einsteinschen Summenkonvention über die Indizes k und l summiert wird. c_{ijkl} sind die 81 Komponenten des Elastizitätstensors, der sich wegen der Symmetrie von S_{ij} und T_{ij} und aus Gründen der Energieerhaltung auf maximal 21 unabhängige Komponenten reduzieren läßt. Auch diese Anzahl verringert sich weiter mit zunehmender Kristallsymmetrie. So hat der Elastizitätstensor des in dieser Arbeit als SAW-Medium verwendeten trigonalen LiNbO_3 sechs unabhängige elastische Konstanten. Die Beschleunigung, die die Volumenelemente des Mediums bei Krafteinwirkung erfahren, wird durch das Dritte Newtonsche Axiom beschrieben, das in der Elastizitätstheorie die Form

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} \quad (2.3)$$

annimmt. Hierbei ist ρ die Dichte. Mit den Gleichungen 2.2 und 2.1 ergibt sich aus Gleichung 2.3 die Wellengleichung:

$$\rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} = c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} \quad (2.4)$$

Im Falle piezoelektrischer Medien muß nun berücksichtigt werden, daß eine Deformation zu einem elektrischen Feld \mathbf{E} führt. Über den piezoelektrischen Tensor e_{kij} ist dieser mit dem Spannungstensor \mathbf{T} verknüpft. e_{kij} hat 18 unabhängige Komponenten, deren Anzahl sich mit steigender Kristallsymmetrie reduziert; im Falle des LiNbO_3 sind dies vier unabhängige Komponenten. Die Gleichung 2.2 lautet hiermit:

$$T_{ij} = c_{ijkl} S_{kl} - e_{kij} E_k \quad (2.5)$$

Ist der Festkörper dielektrisch, muß zusätzlich beachtet werden, daß der elektrische Verschiebungsvektor \mathbf{D} im verspannten Festkörper über

$$D_i = \varepsilon_{ij} E_j + e_{ijk} S_{jk} \quad (2.6)$$

mit der elektrischen Feldstärke und dem Deformationstensor verknüpft ist. Dabei ist ε_{ij} der dielektrische Tensor. Die Gleichungen 2.3, 2.5 und 2.6 lassen sich zu den Wellengleichungen des piezoelektrischen Mediums kombinieren.

$$\rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} = c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} + e_{kij} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_k \partial x_i} \quad (2.7)$$

$$\varepsilon_{ik} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_k} = e_{ikl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} \quad (2.8)$$

Hierbei ist φ das über $E_i = -\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}$ mit der elektrischen Feldstärke verknüpfte elektrische Potential. Die Aufgabe der Akustik besteht nun darin, Lösungen (\mathbf{u}, φ) der Wellengleichungen 2.8 zu finden. Dies ist nur dann möglich, wenn Randbedingungen festgelegt werden, die das Verhalten der beteiligten physikalischen Größen an der Grenzfläche und in weiten Entfernungen von ihr angeben. So muß bei einer an Luft grenzenden Fläche die Normalkomponente T_{3i} der Spannung gleich Null sein, weil die Luft keine Kraft auf die Oberfläche ausübt. Ist das Medium leitend oder ist die Oberfläche metallisiert, dann ist die Grenzfläche kurzgeschlossen, das elektrische Potential φ verschwindet, und es gilt $\Delta\varphi = 0$. In Schichtsystemen müssen auf diese Art Randbedingungen für jede Grenzfläche formuliert werden.

Die wohl am häufigsten verwendete Methode zur Lösung der Wellengleichungen ist der Partialwellenansatz. Die Gesamtwellenfunktion ist dabei eine Linearkombination von Partialwellen, die jede für sich die Wellengleichungen erfüllen. Die Gewichtungskoeffizienten werden dabei so gewählt, daß die Gesamtwellenfunktion die gestellten Randbedingungen erfüllt. Mathematisch bedeutet dies, daß die Determinante der Koeffizientenmatrix verschwindet. Die von Adler entwickelte Transfer-Matrix-Methode [37, 38] ist ein weit verbreiteter Algorithmus, um die Gewichtungskoeffizienten beim Partialwellenansatz zu bestimmen.

2.2 Die Rayleighwelle

An der Oberfläche eines isotropen Festkörpers hat die Wellengleichung 2.4 lediglich eine Lösung, die nach ihrem Entdecker benannte Rayleighwelle [3]. Obwohl bei den meisten Ultraschallanwendungen piezoelektrische und anisotrope Materialien verwendet werden, existieren auch in diesen Materialien Wellen des Rayleigh-Typs, die die in diesem Abschnitt vorzustellenden Eigenschaften der Rayleigh-Welle im isotropen Festkörper hat. Obwohl die SAW-STM-Methode nicht auf Wellen des Rayleigh-Typs beschränkt ist, beschränkt sich diese Arbeit in den Experimenten ausschließlich auf Wellen des Rayleigh-Typs. Daher wird die Rayleighwelle hier im Detail behandelt.

Das elastische Verhalten des isotropen Festkörpers ist durch seine Dichte ρ und die elastischen Konstanten c_{11} und c_{44} bestimmt. In ihm existieren drei Volumenwellen-Moden, die Longitudinalwelle und zwei entartete Scherwellen mit transversaler Polarisierung. Es sind dabei entsprechend $v_l = \sqrt{c_{11}/\rho}$ und $v_t = \sqrt{c_{44}/\rho}$ die Ausbreitungsgeschwindigkeiten. Aus der Determinantengleichung zur Bestimmung der Gewichtungskoeffizienten (vergleiche 2.1) folgt die Rayleigh-Gleichung für die Geschwindigkeit v_R der Rayleighwelle:

$$\left(\frac{v_R}{v_t}\right)^6 - 8\left(\frac{v_R}{v_t}\right)^4 + 8\left(3 - 2\frac{v_t^2}{v_l^2}\right)\left(\frac{v_R}{v_t}\right)^2 - 16\left(1 - \frac{v_t^2}{v_l^2}\right) = 0. \quad (2.9)$$

Aus der Randbedingung, die das Abklingen der Partikelverschiebungskomponenten mit der Tiefe im Medium verlangt, folgt $v_R < v_t$. Es läßt sich zeigen, daß es nur eine Lösung v_R der Rayleigh-Gleichung gibt, die diese Ungleichung erfüllt. Da in realen isotropen Medien das

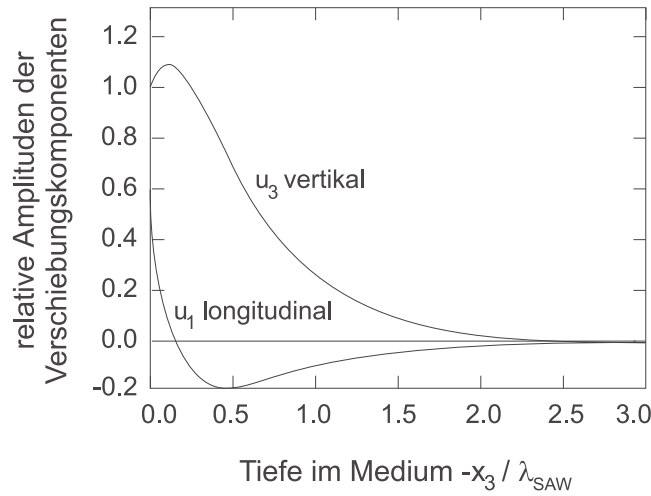


Figure 2.1: Die Amplituden der Verschiebungskomponenten einer Rayleighwelle in Abhängigkeit von der Tiefe im Medium. Die longitudinale Auslenkung ist an der Oberfläche und die vertikale Auslenkung knapp unter ihr maximal. Nur eine zwei Wellenlängen dicke Oberflächenschicht wird spürbar von der Rayleighwelle verformt.

Verhältnis v_t/v_l zwischen 0 und 0.7 liegt, ist die Rayleighwelle somit die langsamste Welle im isotropen Festkörper. Ihre Verschiebungskomponenten lauten

$$\begin{aligned} u^{(1)} &= \left[A_1 e^{-\alpha k x_3} - A_2 e^{-\beta k x_3} \right] e^{i(\omega t - k x_1)} \\ u^{(2)} &= 0 \\ u^{(3)} &= \left[A_3 e^{-\alpha k x_3} - A_4 e^{-\beta k x_3} \right] e^{i(\omega t - k x_1 - \frac{\pi}{2})} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Die resultierende Welle ist wegen der verschwindenden Scherkomponente $u^{(2)}$ in der Sagittalebene polarisiert, die durch die Ausbreitungsrichtung x_1 und x_3 aufgespannt wird. An der Gleichung 2.10 läßt sich erkennen, daß sich jedes Volumenelement auf einer elliptischen Trajektorie, der sogenannten Oszillationsellipse bewegt. Ihre Halbachsen sind die im folgenden mit $u_1 = A_1 - A_2$ und $u_3 = A_3 - A_4$ abgekürzten Amplituden der Verschiebungskomponenten. Also beschreibt u_1 die longitudinale Partikelverschiebung und u_1 die vertikale. Die Abhängigkeit von u_1 und u_3 von der Tiefe $-x_3$ im Medium ist in Abb. 2.1 dargestellt. Deutlich wird das für akustische Oberflächenwellen charakteristische Abklingen der Verschiebungskomponenten mit der Tiefe. In einer Tiefe von zwei Wellenlänge, ist die Welle auf weniger als 10% ihrer Oberflächenamplitude abgeklungen.

Für das SAW-STM-Experiment ist die Partikelverschiebung an der Oberfläche maßgeblich, denn sie verändert den Tunnelabstand. Sie errechnet sich aus Gleichung 2.10 mit $x_3 = 0$:

$$u^{(1)} = u_1 e^{i(\omega t - k x_1)} \quad (2.11)$$

$$u^{(3)} = u_3 e^{i(\omega t - k x_1 - \frac{\pi}{2})} \quad , \quad (2.12)$$

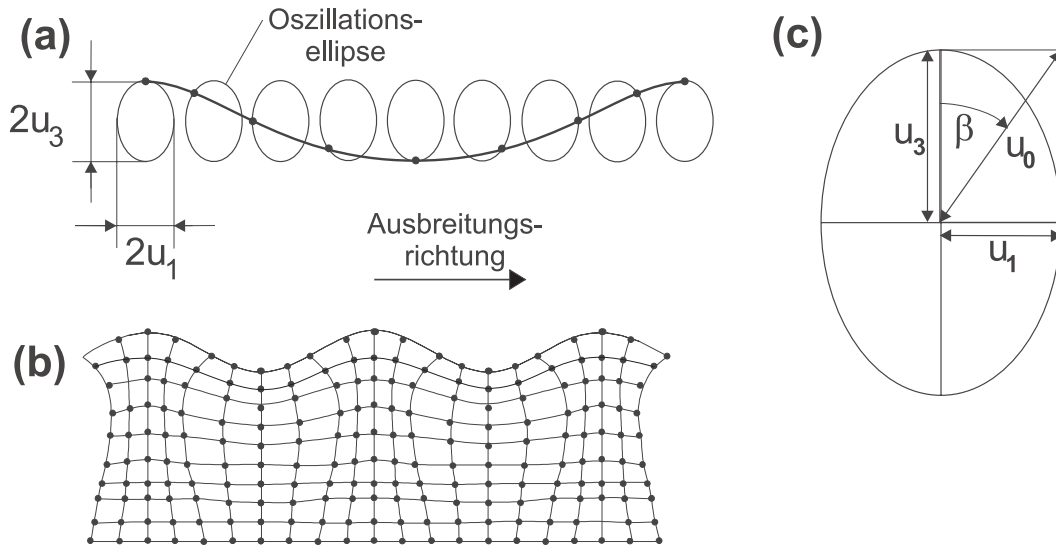


Figure 2.2: Die Partikelverschiebung bei der Rayleighwelle. (a) Jedes Oberflächenelement bewegt sich auf elliptischen Bahnen, den Oszillationsellipsen. Die Einhüllende der so verschobenen Oberflächenelemente ergibt die deformierte Oberfläche. (b) Die Partikelverschiebung der Volumenelemente nimmt mit der Tiefe im Medium ab. (c) Die Halbachsen der Oszillationsellipse u_1 und u_3 sind die Amplituden der longitudinalen bzw. vertikalen Partikelverschiebung, die über den Ellipsenwinkel β miteinander verknüpft sind.

Diese Gleichungen beschreiben die Bewegung der Oberflächenelemente auf der in Abb. 2.2 (c) gezeichneten Oszillationsellipse, deren Halbachsen die Längen u_1 und u_3 haben und die in der Sagittalebene liegt. Die Exzentrizität der Oszillationsellipse wird dabei durch den Ellipsenwinkel β parametrisiert, der durch

$$\beta \stackrel{\text{def}}{=} \tan \frac{u_1}{u_3} \quad (2.13)$$

definiert ist. Wird jedes Oberflächenelement um den Vektor $(u^{(1)}, 0, u^{(3)})$ verschoben, ergibt sich die in Abb. 2.2 (a) dargestellte zeitabhängige Deformation der Oberfläche. Abb. 2.2 (b) zeigt die Verformung des Medium durch die Rayleighwelle. Deutlich ist das Abklingen der Welle mit der Tiefe zu erkennen.

2.3 Weitere Arten akustischer Oberflächenwellen

Wie im vorhergehenden Abschnitt erläutert, ist im isotropen Medium die Rayleighwelle die einzige existierende akustische Oberflächenwelle. Wellen vom Rayleigh-Typ existieren aber auch in bestimmten hochsymmetrischen Kristallrichtungen anisotroper Materialien, wie etwa beim YZ-Schnitt des Lithiumniobats, das in dieser Arbeit als Medium verwendet wird. In weniger symmetrischen Kristallrichtungen, wie z.B. beim ST-Schnitt des Quarz, hat die Partikelverschiebung eine zusätzliche Transversalkomponente, man spricht in diesem Fall von

generalisierten Rayleighwellen. Sie zeigen, sofern sie sich nicht in ausgezeichneten Kristallrichtungen ausbreiten, den Effekt der Strahlsteuerung, bei dem der Energieflußvektor und die Ausbreitungsrichtung nicht parallel sind. Selten sind Bleustein-Gulyaev-Moden, die rein transversal polarisiert sind und nur in bestimmten Piezoelektrika auftreten. Schließlich existieren Moden, sogenannte nichtkoppelnde SAWs, deren Lösung von den elektrischen Randbedingungen unabhängig sind und sich somit nicht durch elektrische Methoden anregen lassen.

Allen akustischen Oberflächenwellen in homogenen Medien ist gemein, daß ihre Ausbreitungsgeschwindigkeit unabhängig von der Wellenlänge ist. Dies hängt damit zusammen, daß das physikalische Problem der Wellenausbreitung in diesem Fall keine Ortsbeschränkung beinhaltet. Wenn eine charakteristische Länge in die Randbedingungen eingeht, tritt Dispersion auf. So kommt es in Schichtsystemen zur Dispersion, weil sich die Welle je nach ihrer Wellenlänge zu unterschiedlichen Anteilen in der Schicht und im Substrat ausbreitet. Bemerkenswert sind auch die rein transversal polarisierten Love-Wellen, die nur in Schichtstrukturen auftreten.

3 Akustische Oberflächenwellen im Experiment

3.1 Der Interdigitalwandler

Während in rein elektronischen Bauelementen der elektrische Strom und die elektrische Spannung die bestimmenden physikalischen Größen sind, werden in SAW-Bauelementen zusätzlich akustische Oberflächenwellen zur Signalverarbeitung verwendet. Da sich SAWs mit einer typischen Ausbreitungsgeschwindigkeit von 3000 m/s um fünf Größenordnungen langsamer als elektromagnetische Wellen ausbreiten, liegen typische SAW-Wellenlängen im Bereich 1 μm bis 1000 μm . Da somit eine Vielzahl akustischer Wellenlängen auf dem Bauelement Platz finden, können zur Signalverarbeitung Wellenphänomene wie Interferenz, Beugung, Reflexion und Laufzeiteffekte ausgenutzt werden. Dies ermöglicht ein breites Spektrum von Anwendungen. Als Frequenzfilter, der auch in der Art eines Resonators ausgeführt werden kann, haben SAW-Bauelemente in Fernseh-Geräten und Mobiltelefonen weite Verbreitung gefunden. Die geringe Ausbreitungsgeschwindigkeit wird in Verzögerungsleitungen ausgenutzt, mit den die Phasenlage eines Radar-Signals geregelt werden kann. Auch als Korrellatoren und in Spread-Spectrum-Kommunikationssystemen kommen SAW-Bauelemente zur Anwendung.

Zur Anregung akustischer Oberflächenwellen und Rückumwandlung in elektrische Signale werden bei SAW-Bauelementen Interdigitalwandler (engl. interdigital transducer, IDT) verwendet¹, die wegen ihrer Effizienz und ihrer kostengünstigen Herstellung der kommerziellen Nutzung von SAW-Bauelementen zum Durchbruch verholfen haben [39]. Sie bestehen aus einer Einlagen-Metallisierung auf einem piezoelektrischen Substrat, die wie in Abb. 3.1 (a) ersichtlich zwei Elektroden in der Form zweier ineinandergreifender Kammstrukturen bildet. Jede Kammstruktur besteht aus sogenannten Fingerelektroden, deren Mitten der Abstand d ist. Die Überlappungslänge beider Kammstrukturen wird als die akustische Apertur w bezeichnet. Wird zwischen den Elektroden eine Spannung angelegt, so besteht zwischen den Fingern der Elektroden ein elektrisches Feld abwechselnden Vorzeichens. Dieses bewirkt über den inversen piezoelektrischen Effekt [40] eine periodische Dehnung bzw. Stauchung des oberflächennahen Volumens des Substrats. Im Falle einer Wechselspannung der Frequenz f wirkt jedes Fingerpaar als Quelle einer akustischen Oberflächenwelle, die sich zu beiden Seiten vom Fingerpaar mit der Geschwindigkeit v_{SAW} wegbewegt. Ist die durch $\lambda = v_{\text{SAW}}/f$ gegebene Wellenlänge der SAW gleich der Periodizität $2d$ des Interdigitalwandlers, interferieren diese Wellen konstruktiv zu einer Gesamtwellen maximaler Amplitude. In diesem Resonanzfall $v_{\text{SAW}}/f = 2d$ stellt sich im Wandler ein oszillierendes Spannungsfeld ein, das dem einer stehenden Welle gleicht, die sich aus zwei gegenläufigen Wellen der Wellenlänge $\lambda = v_{\text{SAW}}/f$ zusammensetzt. Dies erklärt, daß der in Abb. 3.1 (a) gezeichnete Wandler als Bidirektionalwandler arbeitet, also Wellen in beide Richtungen der Wandlerachse abstrahlt. Bei der Entwicklung der effizienteren unidirektional abstrahlenden Wandler kommen komplexere Elektrodendesigns zum Einsatz. Über den Piezoeffekt kann mit einem zweiten Interdigitalwandler die SAW wieder in ein

¹lat. "zwischen den Fingern"

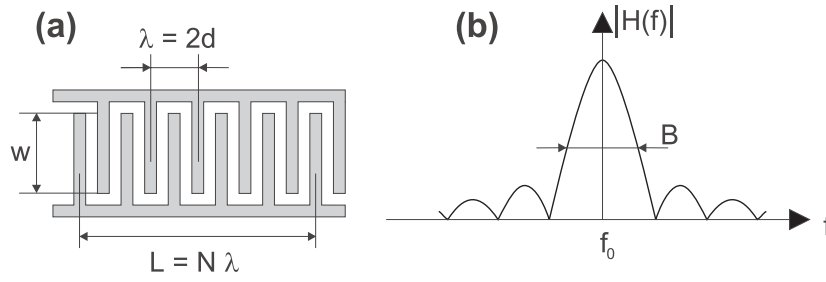


Figure 3.1: Schematisches Design (a) und Frequenzgang (b) eines einfachen Interdigitalwandlers. Die Wellenlänge λ bei der Grundfrequenz f_0 des Wandlers ist gleich dem zweifachen Fingerabstand d . Die Apertur w bestimmt die Breite des akustischen Strahls. Der Frequenzgang folgt einer $\sin x/x$ -Funktion. Die Breite des Paßbandes ist B .

elektrisches Signal rückgewandelt werden. Die Anordnung zweier parallel sich gegenüberstehender Wandler, die durch eine Laufstrecke getrennt sind, wird als Verzögerungsleitung oder als Frequenzfilter verwendet. Das Problem partiell am Empfängerwandler reflektierter Wellen wird hierbei oftmals durch den Einsatz des sogenannten Split-Finger-Designs gelöst, bei dem ein Elektrodenfinger aus zwei parallelen Einzelstreifen besteht. Die Kanten der Elektroden, an denen die Reflexion stattfindet, liegen dabei in Abständen einer Viertel Wellenlänge, so daß sich die reflektierten Einzelwellen destruktiv überlagern und die Nettoreflexion unterdrückt ist.

Wegen der komplexen durch die Wandlergeometrie gegebenen Randbedingungen ist die mathematische Modellierung des Frequenzverhaltens von Interdigitalwandlern schwierig. Zudem müssen die Beugung und die Reflexion der Welle an der Metallisierung genauso beachtet werden wie die Strahlsteuerung, also die Abweichung der Wellenausbreitungsrichtung von der Wandlerachse, die bei bestimmten Kristallrichtungen auftritt. Von den Modellen, die heute in der Entwicklung von Interdigitalwandlern angewendet werden, sei hier nur das Delta-Modell [41] erwähnt. Dieses Modell nähert das räumliche Abstrahlverhalten eines jeden Fingerpaares durch eine Deltafunktion, vernachlässigt also die Breite der Finger. Die Summation über die N Fingerpaare des Wandlers liefert die Response-Funktion $H(f)$ des Wandlers:

$$H(f) = 2N \frac{\sin [N\pi(f - f_0)/f_0]}{[N\pi(f - f_0)/f_0]}, \quad (3.1)$$

wobei $f_0 = v/(2d)$ die Mitten- oder Arbeitsfrequenz des Wandlers ist. Der für die Wellenamplitude entscheidende Absolutbetrag der Response-Funktion ist in Abb. 3.1 (b) aufgetragen. Die Bandbreite $B = v/(2Nd)$ des Wandlers nimmt mit seiner Gesamtlänge Nd ab. Da bei kommerziellen Anwendungen zunehmend Frequenzen im unteren GHz-Bereich verwendet werden und daher immer kleinere Fingerabstände nötig sind, stellt die Herstellung von Interdigitalwandlern immer höhere Anforderungen an die Photolithographie. Erst durch die Verwendung der Elektronenstrahl-Lithographie können jedoch Arbeitsfrequenzen mehrerer GHz erzielt werden [11, 12].

3.2 Weitere Methoden zur Erzeugung von SAWs

Es bestehen mehrere Möglichkeiten, SAWs auch ohne die Verwendung von Interdigitalwandlern anzuregen. So weisen Yamanishi et al. [42] SAWs einer Frequenz von 900 MHz nach, die durch **Modenkonversion einer Volumenwelle** an einem holographisch hergestellte Gitter erzeugt werden. Diese Vorgehensweise war in den 70er Jahren attraktiv, als sich mit den mit konventionellen photolithographischen Methoden erzielbaren Strukturbreiten noch keine Interdigitalwandler im GHz-Bereich herstellen ließen. Während mit diesem Verfahren die Wellenlänge der SAW durch die Gitterperiodizität vorgegeben ist, lassen sich auch mit planaren Piezowandlern, die Volumenwellen erzeugen, SAW unterschiedlicher Wellenlänge anregen: Mit dieser von Oates et al. [43] entwickelten Methode wird der Wandler so an die obere Kante der Stirnseite der Probe gebondet, daß die abgestrahlten Scherwellen in der Probe eine SAW erzeugen.

Zu den nicht-optischen Methoden zur Erzeugung von Ultraschallwellen in Festkörpern gehört der von Schindel und Hutchins entwickelte **Luft-Spalt-Kapazitätswandler** [44]: Zwischen der Probe und einer parallelen kreisförmigen Kondensatorplatte mit wenigen Millimetern Durchmesser wird eine Wechselspannung angelegt. Diese erzeugt in der leitenden oder auch dielektrischen Probe eine Oberflächenladung, die durch das elektrische Wechselfeld einer mechanischen Kraft ausgesetzt ist. Da dieser Anregungsmechanismus theoretisch sehr gut verstanden ist, kann die resultierende Wellenamplitude mit hinreichender Genauigkeit vorhergesagt werden, so daß der Kapazitätswandler als Standardquelle für Ultraschallwellen vorgeschlagen wird. Zudem gelingt es Schindel und Hutchins, dieses Prinzip der Wellenanregung auf flüssige und gasförmige Ausbreitungsmedien zu übertragen [45].

Eine weit verbreitete Methode zur kontaktfreien Erzeugung akustischer Wellen ist die **Anregung durch Laser**. Die Idee, durch Lichteinstrahlung akustische Wellen zu erzeugen, geht auf Graham Bell zurück, der 1881 durch die Bestrahlung einer Metallplatte mit moduliertem Sonnenlicht akustische Wellen erzeugte. Durch die Verwendung von Laserstrahlung ist es möglich, unterschiedliche Wellenmoden kontakt- und zerstörungsfrei anzuregen. In der Regel agiert dabei ein fokussierter Laserspot als Punktquelle, durch die Verwendung von Zylinderlinsen lassen sich aber auch ebene Oberflächenwellen und sich zylindrisch ins Volumen ausbreitende Volumenwellen anregen. Hohe Amplituden lassen sich mit gepulsten Lasern erzielen, wobei die Leistungsdichte des Pulses den Anregungsmechanismus bestimmt [46]: Der Puls erhitzt ein scheibenförmiges Volumen an der Oberfläche der Probe, dessen Tiefe von der thermischen Diffusivität der Probe bestimmt wird. Die Scheibe dehnt sich thermoelastisch in radialer Richtung aus und erzeugt Scher-, Longitudinal- und Oberflächenwellen, deren Amplitude zur Leistungsdichte proportional ist. Bei stärkeren Leistungsdichten erzeugt der Laserpuls ein Plasma, das sich von der Oberfläche wegbewegt und dessen Rückstoß vorrangig SAWs und Longitudinalwellen anregt.

Im Gegensatz zu Pulsverfahren lassen sich mit den vergleichsweise kostengünstigen cw-

Lasern², deren Licht moduliert wird, nur geringe Amplituden erzielen. Abhilfe schafft hier die von Yamanaka et al. [47] vorgestellte SIF-Methode (engl. scanning interference fringe), in der Interferenzstreifen der Periode λ_{int} , die sich mit der Geschwindigkeit v_{int} fortbewegen, die SAW thermoelastisch anregen. Die Amplitude der SAW ist maximal, wenn ihre Ausbreitungsgeschwindigkeit bei der Wellenlänge λ_{int} gleich v_{int} ist. Das Interferenzmuster wird erzeugt, indem einer der beiden interferierenden Laserstrahlen mit einer Bragg-Zelle verstimmt wird. Durch die Verwendung zweier in Reihe angeordneter Bragg-Zellen erreichten Sato et al. [48, 49] SAW-Frequenzen von 200 MHz.

3.3 Methoden zur Detektion von SAWs

Eine Reihe von Meßverfahren steht für die Abbildung akustischer Oberflächenwellen zur Verfügung. Dabei kann man die Wechselwirkung verschiedener Arten von Strahlung mit der SAW ausnutzen, wie etwa Laserstrahlung, Röntgenstrahlung, Elektronenstrahlen und fokussierte akustische Wellen selber. Einen alternativen Ansatz bieten die Rastersondenmethoden, bei denen eine Sonde über eine lokale Wechselwirkung mit der wellentragenden Probe die SAW sichtbar macht. Da es sich um kurzreichweitige Wechselwirkungen handelt, bieten Rastersondenmethoden hierbei in der Regel eine bessere Auflösung als die beugungsbeschränkten auf Strahlung basierenden Meßverfahren.

Eine Methode zur Abbildung und gar zur Ausmessung akustischer Oberflächenwellen ist die **Stroboskopische Röntgen-Topographie** mittels Röntgenbeugung [50]. Hierbei wird die Probenoberfläche phasenstarr mit der SAW-Frequenz von Röntgenpulsen eines Synchrotron-Speicherrings bestrahlt, so daß die Probenoberfläche für die Röntgenstrahlung als durch die SAW verformt, aber ruhend erscheint. Zu diesem Zweck muß die SAW mit der Pulsfrequenz des Speicherringes synchronisiert werden. Für den Kontrast im Röntgenbeugungsbild, der die räumliche Periodizität der verformten Oberfläche wiedergibt, sind nach Cerva zwei Effekte verantwortlich, die experimentell getrennt untersucht werden konnten [51]. Zum einen läßt sich die Bragg-Reflexion der Röntgenstrahlung im oberflächennahen Gebiet der Probe durch eine spekulare Reflexion an ihrer Oberfläche ersetzen. Die Röntgenbeugung wird also wie ein durch die SAW statisch wellig verformter Spiegel behandelt, der in den Wellentälern fokussierend und den Wellenbergen defokussierend auf die Röntgenstrahlung wird. Daneben beeinflußt die SAW-bedingte räumlich Dehnungsmodulation die Röntgenbeugung. Es konnten Ray-Tracing-Simulationen durchgeführt werden, die die gemessenen Röntgenbilder reproduzieren. Zolotoyabko et al. gelingt es, mit der stroboskopischen Röntgen-Topographie die Beugung von SAWs an Spannungsfeldern, die in der Nähe von Versetzungen bestehen, abzubilden [4].

Eine weniger aufwendige Methode zur Abbildung stehender und progagierender SAW-Wellenfelder in piezoelektrischen Materialien ist die Verwendung eines **Rasterelektronen-**

²continuous wave

mikroskops (SEM³). Es wird ausgenutzt, daß sich durch den piezoelektrischen Effekt auf der Probenoberfläche in Anwesenheit einer SAW eine periodisches elektrisches Potential ausbildet, das die vom SEM registrierten Sekundärelektronen aufzeichnet. Durch ein Strahlablenksystem [52], das mit der SAW synchronisiert ist, gelingt es, ein stroboskopisch ruhendes Bild des Wellenfeldes aufzunehmen. Tanski und Wittels [53] konnten mit dieser Methode transversale Moden in SAW-Resonatoren abbilden. Eine weiteres Beispiel für die Anwendungsmöglichkeiten dieser Methode, ist die Abbildung von Reflexionen und Beugung von SAWs an Domänenwänden des wellenführenden Kristalls [54, 55]. Ebenfalls mit dem Rasterelektronenmikroskop bilden Roshchupkin et al. [56] akustische Oberflächenwellen ab, die von einem planaren elektrischen Wechselfeld erzeugt wurden, dem ein LiNbO₃-Kristall mit einer periodischen Domänenstruktur ausgesetzt wurde.

Der Einfluß akustischer Oberflächenwellen auf die optischen Eigenschaften eines Festkörpers ermöglicht eine Vielzahl von Möglichkeiten der **optischen Detektion von SAWs**. In der Regel wird hierbei ein Laserstrahl auf die von der SAW verformte Probenoberfläche fokussiert, wobei die Fokusgröße kleiner als die akustischer Wellenlänge sein muß. Die Modulation der Länge des optischen Weges wird bei der Interferometrie ausgenutzt. Mit ihr lassen sich Auslenkungen der Oberfläche von nur 10^{-7} Å nachweisen [8]. Die sogenannte Displacement-Methode [9, 57], die auch zur Detektion thermischer Wellen verwendet wird, betrachtet dagegen die Winkelmodulation eines Laserstrahls, der von der durch die SAW zeitlich periodisch verformte Oberfläche reflektiert wird. Die geringen Winkelablenkungen werden mit einer Quadrantendiode aufgezeichnet und durch ein Lock-In-Verfahren verstärkt. Auch mittels Abhängigkeit der Reflektivität von der Verspannung können SAWs detektiert werden. Dabei wird die Reflektivität der Probenoberfläche durch die akustische Oberflächenwelle moduliert, was zu einer meßbaren Intensitätsmodulation des reflektierten Laserstrahls führt. Mit dieser Methode gelingt es Santos [10], die SAW zwischen den Fingern eines Interdigitalwandlers nachzuweisen.

Ein in der mikroskopischen Strukturforschung etablierte Ultraschall-Technik zur hochauflösenden Abbildung elastischer Eigenschaften von Festkörpern ist die von Quate et al. [58] entwickelte **Akustische Mikroskopie**. Es wird eine elastische Longitudinalwelle von einem Piezowandler erzeugt, von einer akustischen Linse durch ein flüssiges Kopplungsmedium auf die Probe fokussiert, von dieser reflektiert und durch dasselbe Linsensystem zum Piezowandler zurückgeleitet, um wieder in ein aufzuzeichnendes elektrisches Signal umgewandelt zu werden. Dies geschieht gepulst, damit im Wandler der erzeugende und der reflektierte Wellenpuls zeitlich voneinander getrennt werden können. Indem der Fokus des Laserstrahls die Probe abtastet und die Amplitude der reflektierten Welle aufgezeichnet wird, entsteht so ein Bild, dessen Kontrast von den lokalen elastischen Eigenschaften im akustischen Fokus abhängt. Somit können lokale Unterschiede in der Dichte, in der Schallgeschwindigkeit und Grenzflächen unterschiedlicher Materialien als akustischer Kontrast abgebildet werden. In-

³engl. scanning electron microscope

dem der akustische Strahl unterhalb der Probenoberfläche fokussiert wird, wird eine Tiefenauflösung erzielt. Die Auflösung ist durch die Fokusgröße bestimmt und somit gemäß dem Abbeschen Gesetz frequenzabhängig. Bei maximalen Frequenzen von 2 GHz wird eine Auflösung im Bereich von weniger als $1\ \mu\text{m}$ erzielt [59].

Zur quantitativen Bestimmung elastischer Konstanten mit dem akustischen Mikroskop wird das gemessene Signal am Piezowandler V in Abhängigkeit der Tiefe z des Fokus unter der Probenoberfläche aufgezeichnet. Diese sogenannten $V(z)$ -Kurven weisen Oszillationen auf, die durch die Interferenz zweier Teilwellen entstehen: Zum einen reflektiert der Fokusbereich der Probe die eingestrahlte Welle zurück in Richtung Detektor. Zum anderen erzeugt die eingestrahlte Welle beim Eintritt in die Probe Leckwellen, die sich an der Oberfläche ausbreiten⁴, von dort durch das Kopplungsmedium zum Detektor zurückstrahlen. Eine mathematische Analyse [60] der $V(z)$ -Kurven liefert dann die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Leckwelle. Wird anstatt eines punktförmigen ein linienförmiger Fokus verwendet (Line-Focus Acoustic Microscopy) können auch in anisotropen Materialien Leckwellen gezielt angeregt werden. Xiang et al. [61] messen auf diese Weise die Winkelabhängigkeit der Ausbreitungsgeschwindigkeit von Pseudo-Oberflächenwellen und SAWs auf dem Z-Schnitt des Quarz.

Mit einer Weiterentwicklung des akustischen Mikroskops gelang es Drescher-Krasicka et al. [62], die Verteilung der mechanischen Spannung in der Probe abzubilden. Hierbei wird ausgenutzt, daß mechanischen Verspannungen die Ausbreitungsgeschwindigkeit und damit die Phasenlage von Scherwellen beeinflussen. Die auf die Probenoberfläche fokussierte Longitudinalwelle erzeugt beim Eintritt in die Probe und bei der Reflektion an der Probenrückseite unterschiedliche Scherwellenmoden, die sich beim Austritt aus der Probe zu der aufzuzeichnenden Longitudinalwelle addieren. Die Amplitude des Messsignals hängt daher von der Phase der interferierenden Scherwellen ab, wird also von der mechanischen Spannung auf dem Pfad der Scherwellen durch die Probe bestimmt. Rastert der anregende akustische Fokus die Probe ab, ergeben sich Verteilungsbilder der Verspannung, wie am Beispiel von Schweißnähten demonstriert wurde.

Anstatt wie beim akustischen Mikroskop die zu detektierende Welle über ein Kopplungsmedium und eine akustische Linse zum Wandler zu leiten, kann der Wandler auch im direkten Kontakt zur Probenoberfläche positioniert sein. Every und Sachse [63] demonstrieren, wie mit Laseranregung und Detektion mit Wandlern kleiner Apertur das Wellenfeld der Probe abgebildet werden kann. Daß Piezowandler sowohl als Quelle als auch als Detektor bei der Untersuchung der anisotropen SAW-Ausbreitung verwendet werden können, zeigen Vines et al [64]. Bei der Auswahl der Methoden der zur Abbildung von SAWs kommt eine besondere Bedeutung den Rastersondenmethoden zu: Ihre Auflösung ist weder von der Wellenlänge des Lichts noch von der akustischen Wellenlänge begrenzt. Sie sind daher vielversprechend für die Sichtbarmachung der Wechselwirkung akustischer Oberflächenwellen mit Nanostrukturen, wie etwas Quantenpunkten und -drähten. Kirk et. al [23] demonstrieren den Einfluß der

⁴engl. "leaky SAW"

wellenbedingten Modulation des Tunnelabstandes auf den Tunnelstrom beim **Rastertunnelmikroskop**. Auch wenn die Frequenz der SAW die Bandbreite der STM-Elektronik bei weitem überschreitet, hat doch die Abstandsmodulation auch einen Einfluß auf dem mittleren Tunnelstrom. Wird das STM im Constant-Current-Modus betrieben, führt eine Amplitudenmodulation der Welle zu einer meßbaren synchronen Modulation des Tunnelabstandes. Dieses Verhalten erklären Kirk et. al durch die Gleichrichtung der Abstandsmodulation an der nicht-linearen Strom-Abstandskennlinie des Tunnelüberganges.

Bei der **Akustischen Tunnelmikroskopie** nach Takata et. al [24] wird die Spitze des STM in Oszillation versetzt und überträgt während des Tunnelns Schwingungen auf die Probe, die mit einem rückseitigen Piezowandler detektiert wird. Die Abstandsregelung führt die Spitze so, daß das Signal am Piezowandler konstant bleibt. Der aufgezeichnete Tunnelstrom gibt also die Effizienz der elastischen Wechselwirkung zwischen Spitze und Probe wieder. Da diese von den lokalen elastischen Eigenschaften der Probe abhängt, gelang es, den Unterschied in den elastischen Eigenschaften zwischen undotiertem und mit Arsen dotiertem Silizium abzubilden. Heil et al. [25] demonstrieren, wie mit dem Rastertunnelmikroskop die longitudinale Auslenkungskomponente einer SAW in absoluter Kalibrierung gemessen werden kann. Es wird im Constant-Current-Modus eine Graphit-Oberfläche in atomarer Auflösung abgebildet, über die eine akustische Oberflächenwelle läuft. Heil et al. beobachten eine Abhängigkeit des Bildkontrasts von der Amplitude der Welle. Ein Modell über den Bildkontrast bei einer oszillierenden Oberfläche erklärt dieses Verhalten und ermöglicht die Vermessung der longitudinalen Auslenkung. Diese Methode ist auf periodische Oberflächenstrukturen beschränkt und erfordert für die Signalstabilität Helium-Temperaturen.

Unterhalb der optischen Auflösungsgrenze arbeitet ebenfalls am Paul-Drude-Institut entwickelte **Akustische Rasterkraftmikroskopie** [65] (SAFM, engl. scanning acoustic force microscopy). Sie nutzt die nicht-lineare Abstandskennlinie der Kraftwechselwirkung zwischen der Probe und dem vom konventionellen Rasterkraftmikroskop bekannten Cantilever. Wird der Abstand zur Probe durch die akustische Oberflächenwelle bei einer Frequenz moduliert, die die Resonanz des Cantilever überschreitet, resultiert eine zeitlich konstante Kraft auf den Cantilever. Bei SAFM-Amplitudenmessungen wird die SAW amplitudenmoduliert und die resultierende synchron modulierte Kraft auf den Cantilever aufgezeichnet. So gelingt die Abbildung der Amplitude von Wellenfeldern. Bei der SAFM-Phasenmessung wird der akustischen Oberflächenwelle eine zweite SAW überlagert, deren Frequenz leicht gegenüber der ersten verschoben ist. Aus der nicht-linearen Abstandskennlinie der Kraftwechselwirkung resultiert ein Meßsignal bei der Differenzfrequenz, dessen Phase die Phase der ersten Welle wiedergibt. Wie Chilla et. al [66] demonstrieren, läßt sich mit der SAFM-Methode die SAW-Ausbreitungsgeschwindigkeit mit einer Auflösung von 20 nm bestimmen. Zudem ist das SAFM auch auf rein transversal polarisierte SAW-Moden empfindlich. So konnten Behme et. al [67] erstmals Hochgeschwindigkeits-Pseudo-Oberflächenwellen direkt nachweisen. Wegen der nicht stark lokalisierten Kraftwechselwirkung zwischen der Probe und dem Cantilever

ist die SAFM-Methode in der Auflösung der SAW-STM-Methode unterlegen. Zudem kann bei der SAFM-Phasenmessung das benötigte Referenzwellenfeld die ursprünglich abzubildenden Wellenfronten verzerren, wenn es selber durch Streuung verzerrt worden ist.

Oliver et al. [19] gelang es, mit einem heterodyn, ebenfalls auf der Rasterkraftmikroskopie basierenden Meßverfahren, die Polarisierung des piezoelektrischen, die SAW tragenden Substrats abzubilden. Hierbei wird ausgenutzt, daß das mit der SAW verknüpfte elektrische Feld des Substrats die Spitze des Cantilevers polarisiert. Die resultierende Kraftwechselwirkung beeinflußt die Schwingung des Cantilevers in Abhängigkeit von der lokalen Phase der Polarisierung des SAW und der Phase einer amplitudenmodulierten Wechselspannung bei der SAW-Frequenz, die an der Spitze anliegt.

4 Theoretische Grundlagen

4.1 Ein Überblick über die Theorien der Rastertunnelmikroskopie

Die zentrale Fragestellung in der Theorie des STM-Experiments ist die Abhängigkeit des Tunnelstroms I_t vom Tunnelabstand d und von der Tunnelspannung V_T . Eine vollständige Lösung dieses Problems ist bis heute nicht gefunden worden, weil eine Reihe von Aspekten die theoretische Beschreibung des Tunnelns erheblich erschweren: Um $I_t(d, V_T)$ theoretisch zu bestimmen, muß das System aus Spitze und Probe dreidimensional behandelt werden. Schon die Beschreibung der elektronischen Struktur einer atomar glatten Festkörperoberfläche ist sehr aufwendig [68]; für eine reale STM-Spitze ist sie nahezu unmöglich, es sei denn, man beschreibt sie als einen einzelnen atomaren Zustand [69]. Ferner bergen Spitze und Probe keine Symmetrien, die das dreidimensionale System vereinfachen. Bei im Experiment üblichen Tunnelabständen von wenigen Å können die Wellenfunktionen von Spitze und Probe nicht mehr getrennt betrachtet werden, da sie durch die Wechselwirkung von den ungestörten Wellenfunktionen abweichen. Hierdurch wird mit abnehmendem Tunnelabstand die isolierende Potentialbarriere bis unter die Fermi-Energie der Spitze bzw. der Probe abgesenkt. Der resultierende Leitungsmechanismus ist dann nicht mehr das Tunneln, so daß die unten erklärte Transfer-Hamiltonian-Näherung und die WBK-Methode (Wenzel-Kramers-Brillouin) [70] nicht mehr gerechtfertigt erscheinen. Zudem verformen sich die Spitze und die Probe durch die elektrostatische Anziehung, was bei einer festen Position der Spitze zu einer nicht zu vernachlässigenden Verringerung des Tunnelabstandes führt [20]. Um das elektrische Feld zwischen Spitze und Probe korrekt zu beschreiben, müssen auch Spiegelladungseffekte [71] berücksichtigt werden.

Der Weg zur theoretischen Beschreibung des STM-Experimentes führt also nur über vereinfachende Annahmen und über eine Auswahl der zu berücksichtigenden physikalischen Aspekte [72]. Im folgenden wird eine Theorie skizziert [73], die das Tunnelexperiment auf das Tunneln zwischen planaren Metallelektroden zurückführt. Der weiter unten beschriebene WBK-Ansatz von Simmons [34] erweitert diese Rechnung auf nicht rechteckige Barrieren. Die auf diese Art abgeleitete Gleichung für die Spannungs- und Abstandsabhängigkeit des Tunnelstromes wird als Grundlage für die Theorie des SAW-STM-Signals herangezogen. Eine dreidimensionale Beschreibung wurde von Lang [74] entwickelt, in dem er Spitze und Probe jeweils als ein Ensemble aus einer planaren Festkörperoberfläche und einem Adatom betrachtet. Unter Verwendung des Jellium-Modells für die elektronische Struktur der Festkörperoberflächen, gelingt es Lang, die Stromdichteverteilung für verschiedene Orte der Adatome zu bestimmen. Zu einer realistischeren Beschreibung des Tunnelvorgangs gelangt die Theorie von Tersoff und Hamann [33], indem die Spitze durch ein Atom mit einer s-Wellenfunktion ersetzt und die Probe mit der elektronischen Zustandsdichte beschrieben wird. Diese Theorie, die am häufigsten zur Interpretation von STM-Bildern herangezogen wird, wird im Abschnitt 4.1.3 eingeführt.

4.1.1 Tunneln durch ein eindimensionales Rechteckpotential

Der wohl einfachste Ansatz zur Beschreibung des Tunnelexperiments besteht darin, die eindimensionale Schrödinger-Gleichung für ein einzelnes Elektron bei der Transmission durch eine rechteckige Potentialbarriere mit der Breite d und der Höhe U zu lösen [70]. $\Psi_0 e^{-ikz}$ sei die Wellenfunktion des einlaufenden Elektrons vor der Potentialbarriere. Die kinetische Energie E_{kin} des Elektrons ist über $E = (\hbar k)^2/2m$ mit der Wellenzahl k verknüpft, wobei m die Elektronenmasse und \hbar die durch 2π geteilte Plancksche Konstante ist. Lösen der Schrödinger-Gleichung zeigt, daß das Elektron in die Potentialbarriere eindringt, auch wenn gilt $E_{kin} < eV_T$, wenn die kinetische Energie also der klassischen Anschauung entsprechend nicht ausreicht, um den Potentialwall zu überwinden. Es ergibt sich für den Tunnelvorgang eine exponentiell abklingende Wellenfunktion der Form $\Psi_0 e^{-\kappa z}$, wobei die reziproke Abklinglänge durch $\kappa = \sqrt{2m(U - E)}/\hbar$ gegeben ist. Das transmittierte Elektron wird von einer Wellenfunktion der Gestalt $\Psi_0 e^{-\kappa d} e^{-ikz}$ beschrieben. Die Wahrscheinlichkeit, mit der das Elektron die Barriere überwindet, beträgt hiernach $e^{-2\kappa d}$.

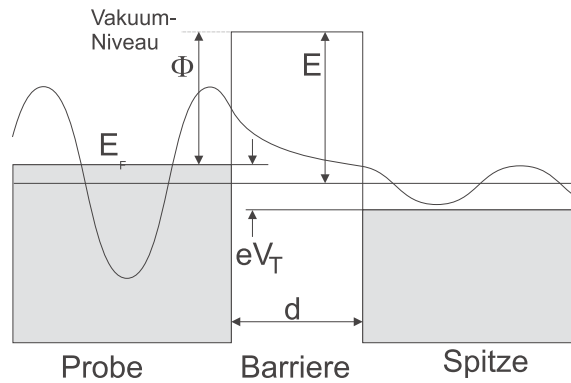


Figure 4.1: Eindimensionaler Metall-Vakuum-Metall-Tunnelübergang. Nur Elektronen der Energie $E_F - eV_T \leq E < E_F$ können von der Probe zur Spitze tunneln. Die Schrödinger-Gleichung liefert für den Bereich außerhalb der Barriere oszillatorische Wellenfunktionen, in der Tunnelbarriere klingt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit exponentiell ab.

Diese eindimensionale Betrachtung wurde von Chen [73] auf den Tunnelstrom zwischen zwei planaren Metallen mit einem freien Elektronengas übertragen. Zwischen den Elektroden liege die Spannung V_T an, so daß das Fermi-Niveau der Spitze gegenüber dem der Probe um eV_T abgesenkt ist. Der Tunnelstrom besteht nur aus den Elektronen, die von einem besetzten Zustand in der Probe in einen unbesetzten der Spitze derselben Energie tunneln können. Dies sind die Elektronen im Energie-Intervall $\{E - eV_T, E\}$. Es sei

$$\rho_S(z, E) = \lim_{\Delta E \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta E} \sum_{E_n = E - eV_T}^E |\Psi_n(z)|^2 \quad (4.1)$$

die lokale Zustandsdichte der Probe am Ort z bei der Energie E . Mit $\Psi_n(z)$ seien dabei die Elektronen-Wellenfunktionen des Festkörpers bezeichnet, deren Energien im Intervall

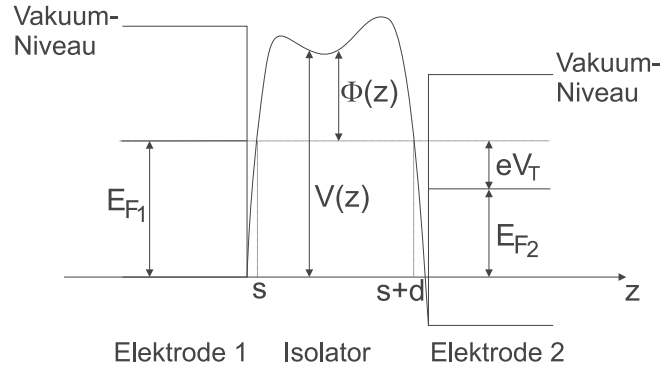


Figure 4.2: Allgemeine Tunnelbarriere im Metall-Isolator-Metall-System nach Simmons [34]

$\{E - eV_T, E\}$ liegen. Nach Chens Betrachtung ist der Tunnelstrom proportional zur lokalen Zustandsdichte der Probenoberfläche bei der Fermi-Energie E_F . Er verhält sich ohmsch und nimmt exponentiell mit der Breite der Barriere ab:

$$I \propto V \rho_S(0, E_F) e^{-2\kappa d} \quad (4.2)$$

Die Abklinglänge errechnet sich aus der Austrittsarbeit Φ der Probe zu $\kappa = \sqrt{2m\Phi}/\hbar$. Austrittsarbeiten von Metallen liegen typischerweise zwischen 4 und 7 eV. Aus der Austrittsarbeit $\Phi_{Au} = 5.4$ eV für Gold läßt sich aus Gleichung 4.2 berechnen, daß der Strom bei Annäherung der Spitze um 1 Å um den Faktor 11 ansteigt. Diese Empfindlichkeit des Tunnelstromes auf die Position der Spitze unterstützt die präzise Abstandsregelung im Constant-Current-Modus.

4.1.2 Die Tunnelcharakteristik nach Simmons

Im folgenden wird die Theorie nach Simmons [34] skizziert, die die Spannungs- und Abstandsabhängigkeit des Tunnelstromes beschreibt. Um das Tunnelproblem eindimensional behandeln zu können, werden Spitze und Probe durch ein planares Metall-Isolator-Metall-System ersetzt (Abb. 4.2). Die Tunnelbarriere hat die allgemeine Form $V(z) = \Phi(z) + E_{F1}$, wobei E_{F1} das Fermi-Niveau der Elektrode 1 und $E_{F2} = E_{F1} - eV_T$ das durch die angelegte Spannung V_T verschobene Fermi-Niveau der Elektrode 2 ist. Der Strom der Elektronen, deren Energie hoch genug ist, um die Tunnelbarriere zu überwinden, werde im folgenden vernachlässigt. Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Elektron von einer Elektrode zur anderen tunnelt, wird durch die WBK-Näherung [70] beschrieben:

$$D(E_z) = \exp \left\{ -\frac{4\pi}{\hbar} \int_{s_1}^{s_2} \sqrt{2m(V(z) - E_z)} dz \right\} \quad (4.3)$$

Unter der Annahme einer isotropen Geschwindigkeitsverteilung der Elektronen entsprechend der Fermi-Verteilungsfunktion $f(E)$ wird nun die Anzahl der Elektronen mit der Geschwindigkeitskomponente v_x berechnet

$$n(v_x) = \frac{4\pi m^3}{h^3} \int_0^\infty f(E) dE_r, \quad (4.4)$$

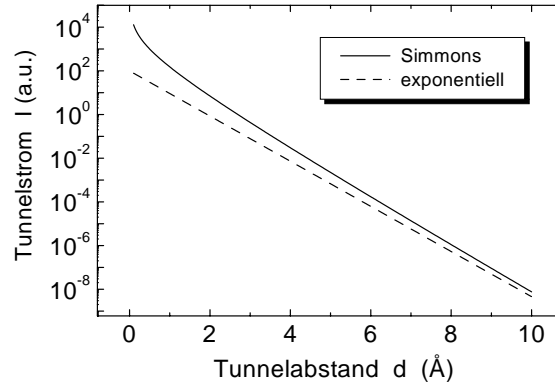


Figure 4.3: Vergleich der Abstandsabhängigkeit des Tunnelstroms nach Simmons [34] mit der rein exponentiellen Abstandsabhängigkeit

wobei $E_r = mv_r^2$ mit $v_r^2 = v_x^2 + v_y^2$ die kinetische Energie der Bewegung der Elektronen parallel zur Grenzfläche darstellt. Die Anzahl der zur Elektrode 2 tunnelnden Elektronen läßt sich als Integral über die Geschwindigkeitsverteilung in x-Richtung darstellen:

$$N_{1 \rightarrow 2} = \int_0^\infty v_x n(v_x) D(E_x) dv_x = \frac{1}{m} \int_0^\infty n(v_x) D(E_x) dE_x \quad (4.5)$$

Mit Gleichung 4.4 ergibt sich

$$N_{1 \rightarrow 2} = \frac{4\pi m^2}{h^3} \int_0^\infty D(E_x) dE_x \int_0^\infty f(E) dE_r \quad (4.6)$$

Im entsprechenden Ausdruck $N_{2 \rightarrow 1}$ für die zur Elektrode 1 tunnelnden Elektronen ist $f(E)$ durch $f(E + eV_T)$ zu ersetzen. Der Tunnelstrom ist proportional zu $N_{1 \rightarrow 2} - N_{2 \rightarrow 1}$:

$$I \propto N_{1 \rightarrow 2} - N_{2 \rightarrow 1} = \frac{4\pi m^2}{h^3} \int_0^\infty D(E_x) dE_x \int_0^\infty [f(E) - f(E + eV_T)] dE_r \quad (4.7)$$

Simmons führt eine mittlere Barrierenhöhe $\bar{\Phi} = (1/d) \int_s^{s+d} \Phi(z) dz$ ein und zeigt, daß für kleine Spannungen $eV_T \ll \bar{\Phi}$ der Tunnelstrom näherungsweise als Funktion von $\bar{\Phi}$ geschrieben werden kann:

$$I = \frac{e^2 \kappa}{2\pi h} \frac{V_T}{d} e^{-2\kappa d} \quad (4.8)$$

Hierbei ist $\kappa = (2\pi/h) \sqrt{2m(\bar{\Phi})}$ die reziproke Abklinglänge. Gleichung 4.8 ist der Ausgangspunkt der Theorie des SAW-STM-Signals (Abschnitt 4.2.2). In Abb. 4.3 wird diese Abstandsabhängigkeit des Tunnelstroms nach Simmons mit der rein exponentiellen Abstandsabhängigkeit nach Chen (Gleichung 4.2) verglichen. Dabei wurde mit der reziproken Abklinglänge $\kappa = 1.19 \text{Å}^{-1}$ gerechnet. Da Gleichung 4.2 nur eine Proportionalität beschreibt, können die beiden Kurven nur bis auf einen frei wählbaren Faktor miteinander verglichen

werden. Für nicht zu kleine Tunnelabstände d klingt der Tunnelstrom in beiden Modellen exponentiell mit einer Steigung von ungefähr einer Dekade pro 1 \AA ab, was der experimentellen Faustregel für die Abstandsabhängigkeit des Tunnelstromes entspricht.

4.1.3 Die Theorie des Tunnelns nach Tersoff und Hamann

Die bisher vorgestellten Theorien zur Rastertunnelmikroskopie beschrieben den Tunnelvorgang nur für eine planare Tunnelgeometrie. Daher liefern sie ohne eine Übertragung auf eine dreidimensionale Probengeometrie keine Aussagen über die Abhängigkeit des Tunnelstromes von der lateralen Position (x, y) der Spitze im Falle einer korrigierten Probenoberfläche. Dieses Kapitel behandelt deshalb die Theorie von Tersoff und Hamann [33, 68], häufigsten zur Interpretation tunneltunnelmikroskopischer Bilder verwendet wird. Sie trägt der Korrigierung der Probenoberfläche Rechnung, indem diese durch die quantenmechanische Zustandsdichte $\rho(\mathbf{r}, E)$ beschrieben wird, die vom Ort $\mathbf{r} = (x, y, z)$ und von der Energie E abhängt. Um das Problem der unbekannten Spitzengeometrie und ihrer quantenmechanischen Beschreibung zu lösen, wird die Spitze durch eine kugelsymmetrische s -Wellenfunktion ersetzt. Dieses Konzept, die Probenoberfläche quantenmechanisch zu beschreiben und die elektronische Struktur der Spitze zu vereinfachen, hat die Theorie von Tersoff und Hamann in weiten Bereichen zum "Arbeitspferd" der Rastertunnelmikroskopie werden lassen. Sie liefert als Ergebnis, daß der Tunnelstrom proportional zur Dichte der Zustände der Probenoberfläche $\rho(\mathbf{r}_{\text{tip}}, E_F)$ bei der Fermi-Energie und am Mittelpunkt des Krümmungsradius der Spitze ist. Im Constant-Current-Modus folgt die Spitze also Linien konstanter Zustandsdichte der von der Spitze ungestörten Probe. Die Theorie von Tersoff und Hamann beruht auf der Annahme nicht zu kleiner Tunnelabstände und geht von Tunnelspannungen aus, die klein gegenüber der Austrittsarbeit von Spitze und Probe sind. Ferner werden die Besetzungszahlen der Probe bei der Labortemperatur durch diejenigen bei $T = 0 \text{ K}$ ersetzt.

Ausgangspunkt Tersoffs und Hamanns ist die in den 60er Jahren von Bardeen entwickelte Theorie [75], die das Tunneln zwischen zwei Metallelektroden innerhalb der Vielteilchentheorie mit einem Hamilton-Transfer-Operator als zeitabhängige Störung erster Ordnung beschreibt. Anstatt die Schrödinger-Gleichung für das Gesamtsystem aus beiden Elektroden zu lösen, betrachtet er sie als getrennte, sich nicht beeinflussende Teilsysteme, die durch die Wellenfunktionen der Probe Ψ_S und der Spitze Ψ_{tip} beschrieben werden (Abb. 4.4). Diese Annahme ist gerechtfertigt, wenn der Tunnelabstand so groß und die Tunnelspannung gleichzeitig so klein ist, daß das elektrische Feld die Oberflächenwellenfunktionen der Probe nicht beeinflußt. Fermis "Goldene Regel" beschreibt die Tunnelwahrscheinlichkeit w

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{S,\text{tip}}|^2 \delta(E_{\Psi_{\text{tip}}} - E_{\Psi_S}) . \quad (4.9)$$

Es können also die Elektronen nur zwischen Zuständen gleicher Energie tunneln. Die Tunnelwahrscheinlichkeit w ist nach Gleichung 4.9 zum Betragsquadrat des Übergangsmatrixele-

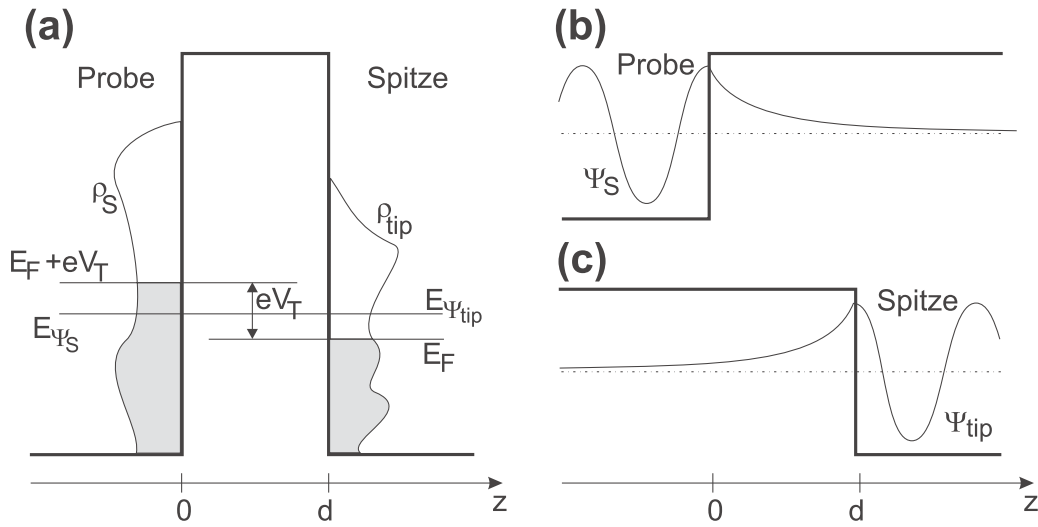


Figure 4.4: Bardeens Ansatz zur Tunneltheorie. (a) Energieschema von Probe und Spitze am Tunnelübergang. Durch Anlegen der Tunnelspannung V_T ist die energieabhängige Zustandsdichte ρ_S der Probe gegenüber der Zustandsdichte ρ_{tip} der Spitze um die Energie eV_T verschoben. (b) und (c) Die Wellenfunktionen der Elektronen in der Probe Ψ_S und in der Spitze Ψ_{tip} berechnet Bardeen im von der jeweiligen Gegenelektrode unveränderten Teilsystem.

ments $M_{S,tip}$ proportional, für das Bardeen die Form

$$M_{S,tip} = \frac{\hbar}{2m_e} \int_{Surface} \left(\Psi_{tip}^* \nabla \Psi_S - \Psi_S \nabla \Psi_{tip}^* \right) dS \quad (4.10)$$

findet. Hierbei tritt im Klammerausdruck der Flußoperator auf, und die Integration erfolgt über eine beliebige Grenzfläche zwischen Spitze und Probe.

Es wird nun der Strom $dI_{S \rightarrow tip}$ der Tunnelelektronen der Energie ε (gerechnet von der Fermi-Energie E_F) von der Probe zur Spitze berechnet, die sich im Energie-Intervall $d\varepsilon$ befinden. Ist $f(E)$ die Fermi-Verteilungsfunktion, die die temperaturabhängige Besetzungswahrscheinlichkeit für einen Zustand der Energie E angibt, dann ist $f(E)\rho(E)$ die Anzahl der besetzten Zustände der Energie E . Der Strom $I_{S \rightarrow tip}$ ist proportional zur Anzahl der besetzten Zustände in der Probe, zur Anzahl der unbesetzten Zustände in der Spitze und nach Gleichung 4.9 zum Betragsquadrat des Übergangsmatrixelements $M_{S,tip}$:

$$dI_{S \rightarrow tip} \propto f(E_F - eV_T + \varepsilon) \rho_S(E_F - eV_T + \varepsilon) (1 - f(E_F + \varepsilon)) \rho_{tip}(E_F + \varepsilon) |M_{S,tip}|^2 d\varepsilon \quad (4.11)$$

Der Summand $-eV_T$ beschreibt dabei die in Abb. 4.4 dargestellte vertikale Verschiebung des Profils der Zustandsdichte der Probe, die aus der an die Probe angelegten Spannung folgt. Analog gilt für den Strom $I_{tip \rightarrow S}$ der Tunnelelektronen der Energie ε von der Spitze zur Probe:

$$dI_{tip \rightarrow S} \propto f(E_F + \varepsilon) \rho_{tip}(E_F + \varepsilon) (1 - f(E_F - eV_T + \varepsilon)) \rho_S(E_F - eV_T + \varepsilon) |M_{S,tip}|^2 d\varepsilon \quad (4.12)$$

Um den Tunnelstrom zu berechnen, muß die Differenz $I_{S \rightarrow tip} - I_{tip \rightarrow S}$ über die Energie ε integriert werden. Dies liefert [73]:

$$I = \frac{4\pi e}{h} \int_{-\infty}^{\infty} [f(E_F - eV_T + \varepsilon) - f(E_F + \varepsilon)] \times \rho_S(E_F - eV_T + \varepsilon) \rho_{tip}(E_F + \varepsilon) |M_{S,tip}|^2 d\varepsilon \quad (4.13)$$

Tersoff und Hamann ersetzen nun die Labortemperatur durch $T = 0$ K, so daß die Fermi-Verteilungsfunktion für $E \leq E_F$ gleich 1 und für $E > E_F$ gleich 0 wird. Hiermit und mit der Näherung, $M_{S,tip}$ im Intervall $[0, eV_T]$ als konstant anzunehmen, folgt aus Gleichung 4.13:

$$I = \frac{4\pi e}{h} |M_{S,tip}|^2 \int_0^{eV_T} \rho_S(E_F - eV_T + \varepsilon) \rho_{tip}(E_F + \varepsilon) d\varepsilon \quad (4.14)$$

Der Tunnelstrom ist also proportional zur Faltung der Zustandsdichten der ρ_{tip} und ρ_S von Spitze zur Probe. Es wird nun angenommen, daß der elektronische Zustand der Spitze, der am Tunneln beteiligt ist, durch eine s-Wellenfunktion

$$\Psi_{tip} \propto \frac{\exp(-\kappa |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{tip}|)}{\kappa |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{tip}|} \quad (4.15)$$

beschrieben wird, wobei \mathbf{r}_{tip} der Krümmungsmittelpunkt der Spitze ist. Aus den Gleichungen 4.14 und 4.15 leiten Tersoff und Hamann her, daß für den Tunnelstrom gilt:

$$I \propto \sum_{E=E_F-eV_T}^{E_F} |\Psi_S(\mathbf{r}_{tip})|^2 \approx eV_T \rho_S(\mathbf{r}_{tip}, E_F) \quad (4.16)$$

Zur zweiten Zeile dieser Gleichung gelangt man, wenn man unter der Annahme einer kleinen Tunnelspannung V_T die Definition 4.1 der lokalen Zustandsdichte anwendet.¹ Gleichung 4.16 ist das zentrale Ergebnis der Theorie von Tersoff und Hamann: Im Rahmen der aufgeführten Näherungen ist der Tunnelstrom proportional zur Zustandsdichte $\rho_S(\mathbf{r}_{tip}, E_F)$ der ungestörten Probe am Ort des Krümmungsmittelpunktes der Spitze.

Auch wenn die Theorie von Tersoff und Hamann eine einfache, anschauliche Anleitung zur Interpretation von STM-Bildern liefert, macht doch der Vergleich gemessener und berechneter STM-Bilder die äußerst schwierige Berechnung der ortsabhängigen Zustandsdichte einer Kristalloberfläche notwendig. So konstruieren Tersoff und Hamann in [33] die Zustandsdichte

¹Die auf eine Dimension z bezogene Definition 4.1 der lokalen Zustandsdichte läßt sich ohne weiteres auf den dreidimensionalen Raum erweitern.

der Au(110)-Oberfläche, indem sie die Zustandsdichte der freien Atome verteilt auf die Gitterplätze der Festkörperoberfläche aufaddieren. Die somit berechneten Flächen konstanter Zustandsdichte zeigen eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen STM-Topographien. Auch gelingt in [33] die Anwendung dieser Theorie auf die Halbleiteroberfläche GaAs(110).

Die Theorie von Tersoff und Hamann versagt jedoch bei atomar glatten Oberflächen ohne Überstruktur: Die Annahme, daß die tatsächliche Wellenfunktion der Spitze durch eine s-Wellenfunktion ersetzt werden kann und die STM-Topographien somit unabhängig von der Form der Spitze sind, widerspricht der experimentellen Erfahrung, daß eine atomare Auflösung nur bei einer speziellen Konfiguration des Apex der Spitze erreicht werden kann. So haben Tersoff und Lang [76] den entscheidenden Einfluß des Zustandes der Spitze auf die Korrugation bei STM-Bildern von Graphit theoretisch beschrieben. Auch sagt die s-Wellennäherung bei atomar glatten Oberflächen Korrugationen der STM-Topographie voraus, die weit unter den gemessenen liegen. Zur Erklärung dieser im Experiment beobachteten atomaren Korrugation nimmt Chen [69] an, daß das Tunneln zwischen der Probe und lokalisierten Oberflächenzuständen der Spitze erfolgt. Bei den betrachteten kleinen Tunnelabständen weniger Å muß die gegenseitige Beeinflussung der Wellenfunktionen der Probe und der Spitze dabei aber berücksichtigt werden. Die im STM-Experiment nur gelegentlich erzielte atomare Auflösung erklärt Chen daher mit der Bildung eines nicht gesättigten d_{x^2} -Orbitals am Apex der Spitze. Einen noch allgemeineren rechnerischen Ansatz verfolgen Liu und Stamp [77], indem sie die dreidimensionale Schrödinger-Gleichung des Gesamtsystems lösen und somit die Kopplung zwischen Spitze und Probe berücksichtigen. Sie gelangen zu dem Ergebnis, daß die Spitze-Probe-Wechselwirkung für den Zustand der Spitze und damit für den Kontrast der STM-Topographie maßgeblich ist.

4.2 Das SAW-STM-Experiment

Die grundlegende Idee des SAW-STM-Experimentes ist es, mit dem Rastertunnelmikroskop akustische Oberflächenwellen abzubilden und auszumessen. Da SAW-Amplituden von Oberflächenwellen-Bauelementen typischerweise im Sub-Nanometer-Bereich liegen [78], besteht der entscheidende Vorteil des STM in der beispiellosen hohen vertikalen und horizontalen Auflösung von 0.01 Å. Läuft eine SAW über die Probenoberfläche, so bewegt sich, wie im Abschnitt 2.2 dargestellt, jedes Oberflächenelement auf einer periodischen Trajektorie. Sie wird durch den Verschiebungsvektor beschrieben, dessen Komponenten in den drei Raumrichtungen eine harmonische Oszillation durchführen. Das Ziel des SAW-STM-Experimentes besteht darin, die Amplituden dieser drei Verschiebungskomponenten und deren Phasenbeziehung zueinander zu bestimmen. Die Trajektorie eines ausgewählten Oberflächenelements wird dabei von den elastischen Eigenschaften nur eines umgebenden Teilvolumens der Probe bestimmt. Dies begründet die Motivation, mit der SAW-STM-Methode quantitative Aussagen über die lokalen elastischen Parameter dieses Teilvolumens zu gewinnen. Auch wenn sich diese Arbeit auf die Untersuchung von Rayleighwellen beschränkt, ist die Methode prinzipiell auf alle Arten akustischer Oberflächenwellen anwendbar.

4.2.1 Das Meßprinzip des SAW-STM – Diskussion möglicher Alternativen

Das Meßprinzip des SAW-STM beruht auf der von der SAW herbeigeführten Modulation des Tunnelabstandes und der damit einhergehenden Modulation des Tunnelstromes. In diesem Kapitel wird vereinfachend angenommen, daß sich die tunnelnden Elektronen nur auf der kürzesten Linie zwischen Spitze und Probe bewegen, deren Länge als Tunnelabstand definiert ist. Ein Ansatz, in der Theorie des Tunnelns alle möglichen Tunnelpfade zu berücksichtigen, liefern Nakagiri und Kaizuka [79]. Befindet sich die Spitze an einer festen Position über der Probe, so ist der Tunnelabstand $d(x, y, t)$ durch die SAW-induzierte Verformung der Oberfläche eine periodische Funktion der Zeit mit der Frequenz f_{SAW} der Oberflächenwelle. Die Abhängigkeit vom Ort (x, y) ist die Voraussetzung für den Kontrast in SAW-STM-Scans. Sie ist auf die Korrugation der Probe zurückzuführen und wird im Abschnitt 4.3 genauer behandelt. Dort wird auch hergeleitet, daß $d(x, y, t)$ im allgemeinen keine harmonische Funktion ist. Zur Untersuchung der SAW wäre es ideal, wenn das SAW-STM den zeitlichen Verlauf des Tunnelabstandes d als Funktion des Spitzenortes (x, y) aufzeichnen könnte. Da die Reaktionszeit des Tunnelüberganges auf Abstandsänderungen im Femtosekunden-Bereich, also weit unterhalb der Periodendauer der SAW liegt [80], ist es im Prinzip möglich, im Constant-Current-Modus die Abstandsmodulation zu messen. Da die Abstandsregelungen gängiger STM-Steuerungen jedoch eine Bandbreite von wenigen kHz haben, ist es ausgeschlossen, die Spitze einer im MHz-Bereich oszillierenden Probenoberfläche nachzuführen. Darüber hinaus liegt die Resonanzfrequenz des Piezoscanners von typischerweise 20 kHz weit unter der Frequenz der auf die Spitze zu übertragenden Oszillation, so daß eine ausreichend schnelle

phasentreue Regelung der vertikalen Spitzenposition unmöglich ist.

Daher liegt die Idee nahe, die Spitze — idealerweise ohne Drift — in einer fixen Position zu halten, und aus dem Tunnelstromsignal $I(x, y, t)$ den zeitlichen Verlauf des Tunnelabstandes zu bestimmen. Hierzu muß die Frequenz der zu detektierenden SAW innerhalb der Bandbreite des Strom-Spannungs-Wandlers des STM liegen. Die Bandbreiten kommerzieller Strom-Spannungs-Wandler liegen jedoch im kHz-Bereich und sind somit für die SAW-Frequenzen, die im MHz-Bereich liegen, unzureichend. Vielversprechend für die zeitaufgelöste Aufzeichnung der Tunnelspannungsmodulation ist jedoch der von Demming et al. [81] für Hochfrequenz-Rastertunnelmikroskope entwickelte Strom-Spannungs-Wandler, dessen maximale Arbeitsfrequenz 35 MHz beträgt.

Ein anderer Ansatz, die zeitliche Auflösung der Tunnelstrommessung zu erhöhen, besteht in der von Botkin et al. [82, 83, 84] entwickelten Pump-and-Probe-Technik. Der Tunnelstrom wird hierbei nur während eines Zeitfensters gemessen. Dieses wird von 120 fs-Laserpulsen definiert, die einen photosensitiven Schalter im Signalweg des Tunnelstromes betätigen. Botkin et al. erzielen somit eine zeitliche Auflösung von unter 1 ps. Man könnte nun diese Methode zur Aufzeichnung des durch die SAW modulierten Tunnelstrom verwenden, indem man die Laserpulse mit der SAW synchronisiert und die Phasendifferenz zwischen der SAW und der Pulsfolge variiert. Das Resultat wäre der zeitliche Verlauf des Tunnelstromes während einer SAW-Periode, der sich aus der Modulation des Tunnelabstandes ergibt.

Anstatt die experimentell aufwendige Kombination aus optischer Pump-and-Probe-Methode und der UHV-Rastertunnelmikroskopie zu verwenden, wurde in dieser Arbeit das von Rohrbeck et al. [30] entwickelte SAW-STM-Meßprinzip [85] weitergeführt. Das Schema des Signalfades ist in Abb. 4.5 dargestellt. Die grundlegende Idee hierbei besteht darin, die hochfrequente Modulation des Tunnelstromes in das Frequenzband der STM-Steuerung zu verlegen. Dies geschieht, indem die Abstandsmodulation an der nicht-linearen Tunnelkennlinie mit einer Modulation der Tunnelspannung gemischt wird, deren Frequenz f_{Vmod} gegenüber f_{SAW} nur leicht verschoben ist. Wie im folgenden Abschnitt gezeigt wird, enthält die Fourierkomponente des Tunnelstromes bei der Differenzfrequenz $\Delta f = f_{Vmod} - f_{SAW}$ die komplette Information über die Amplitude und die Phase der Abstandsmodulation. Wie in Abb. 4.5 ersichtlich, wird diese Fourierkomponente von einem Lock-In-Verstärker phasensensitiv verstärkt. Die Amplitude und die Phase dieses Differenzfrequenz-Signals werden zusammen mit der Topographie während des Scans aufgezeichnet und als Falschfarbenbild dargestellt. Das Differenzfrequenz-Signal und die anderen bei der Mischung entstehenden Frequenzen liegen außerhalb der Verstärkungsbandbreite der STM-Steuerung, so daß im Constant-Current-Modus nur der Gleichstromanteil des Tunnelstromes in die Abstandsregelung eingeht. Gegenüber der Detektion bei der SAW-Frequenz f_{SAW} hat diese Heterodyn-Technik den Vorteil, daß parasitäre Signalanteile der Frequenz f_{SAW} , die die SAW-bedingten Signalanteile überlagern würden, ignoriert werden. Diese sind der am abstandsmodulierten Tunnelübergang auftretende Verschiebungsstrom und das kapazitiv auf die STM-Spitze übertragene Signal mit dem der Interdigitalwandler zur An-

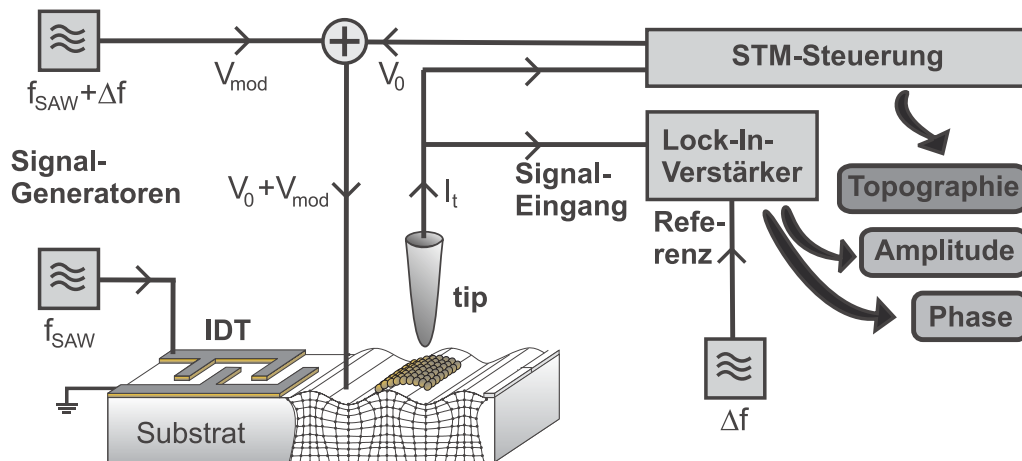


Figure 4.5: Das Meßprinzip der SAW-STM. Die akustische Oberflächenwelle der Frequenz f_{SAW} , die durch den Interdigitalwandler angeregt wird, verursacht eine zeitliche Modulation des Tunnelabstandes. Die Frequenz der resultierenden Modulation des Tunnelstromes I_t beträgt ebenfalls f_{SAW} und liegt somit außerhalb der Verstärkungsbandbreite der STM-Steuerung. Um den Einfluß der SAW auf den Tunnelstrom meßbar zu machen, wird die Tunnelspannung bei der Frequenz $f_{\text{SAW}} + \Delta f$ moduliert. Durch Mischen an der nicht-linearen Strom-Abstands-Kennlinie des Tunnelübergangs entsteht somit ein Differenzfrequenz-Signal, das vom Lock-In-Verstärker phasensensitiv verstärkt wird. Die Amplitude und die Phase des Differenzfrequenz-Signals werden während des SAW-STM-Scans aufgezeichnet und als Falschfarbenbild dargestellt. Das Amplitudenbild gibt dabei die Amplitude der Modulation des Tunnelabstandes wieder; das Phasenbild stellt die Phase dieser Modulation dar.

regung der SAW gespeist wird. Die Amplituden der parasitären Signalanteile können größer als die durch die SAW-induzierte Abstandsmodulation hervorgerufene Modulation des Tunnelstromes bei der Frequenz f_{SAW} sein.

Ergänzend sei bemerkt, daß eine Reihe neuartiger Abbildungsmechanismen des Rastertunnelmikroskops auf der Mischung hochfrequenter Signale an der nicht-linearen Tunnelcharakteristik beruhen. So bildeten Völcker et al. [86, 87] die Graphit-Oberflächen ab, indem sie das Differenzfrequenz-Signal maßen, das durch die Mischung zweier wellenlängenverschobener Infrarot-Laser entsteht. Schmidt et al. [88] konstruierten ein Hochfrequenz-Rastertunnelmikroskop, bei dem zwei leicht frequenzverschobene Tunnelspannungsmodulationen an der nicht-linearen Strom-Spannungs-Kennlinie des Graphit mischen. Im Differenzfrequenz-Signal einer oxidierten Graphit-Oberfläche konnte somit ein chemischer Kontrast nachgewiesen werden. Die Erzeugung höherer Harmonischer eines zur Tunnelspannung addierten HF-Signals und deren Detektion nach Verstärkung in einer Mikrowellen-Kavität wird von Seifert et al. [89] vorgeführt. Kochanski [90] behauptet sogar, Rasterelektronenmikroskopie an Isolatoren durchführen zu können, indem als Tunnelspannung eine reine Hochfrequenz-Wechselspannung verwendet wird, die ein meßbares Tunnelstromsignal bei der dritten Harmonischen erzeugt.

4.2.2 Das SAW-STM-Signal im Constant-Height-Modus

Grundlage für das Verständnis der Abbildung von Oberflächenwellen mit dem SAW-STM ist das SAW-STM-Signal auf einer ebenen Probenoberfläche. In diesem Abschnitt wird die von H.-J. Fröhlich et al. hergeleitete Theorie [91, 92] für das SAW-STM-Signal vorgestellt. Dabei wird der Tunnelabstand als eine bekannte Konstante betrachtet, was diese Theorie auf den in der Rastertunnelmikroskopie selten verwendeten Constant-Height-Modus beschränkt. Wie gezeigt werden wird, hat die durch die SAW hervorgerufene Modulation des Tunnelabstandes unter anderem einen Einfluß auf den Gleichstromanteil des Tunnelstromes. Dies hat zur Folge, daß der Tunnelabstand im meistens verwendeten Constant-Current-Modus selbst von der Amplitude der SAW abhängt. Daher wurde im Rahmen dieser Arbeit eine Theorie entwickelt, die von H.-J. Fröhlichs Theorie ausgeht und für den Constant-Current-Modus gilt. Sie wird im nächsten Abschnitt beschrieben werden.

Ausgangspunkt der Theorie für das SAW-STM-Signal im Constant-Height-Modus ist die von Simmons [34] gefundene nichtlineare Tunnelcharakteristik für zwei planare von einem Isolator getrennte Metallelektroden. Läuft eine Oberflächenwelle der Kreisfrequenz ω_{SAW} über eine im wellenlosen Zustand ebene Probenoberfläche, dann läßt sich der Tunnelabstand als eine Summe des von der Abstandsregelung gesteuerten mittleren Abstandes d_0 und eines harmonischen oszillierenden Anteils der Amplitude d_1 darstellen:

$$d(t) = d_0 + d_1 \cos[\omega_{SAW}t - \varphi] \quad (4.17)$$

Hierbei ist d_1 die Amplitude der Wellenbewegung senkrecht zur Oberfläche und $\varphi = 2\pi x/\lambda$ die lokale Phase der sich in x-Richtung fortbewegenden Welle. Im Falle der ebenen Probenoberfläche besteht keine Ortsabhängigkeit von d . Zur heterodynischen Mischung an der nicht-linearen Tunnelcharakteristik wird ein Hochfrequenz-Signal zur konstanten Tunnelspannung addiert:

$$V(t) = V_0 + V_1 \cos(\omega_{V_{mod}}t) \quad (4.18)$$

Die Gleichung 4.8 beschreibt den Tunnelstrom pro Einheitsfläche. Verwendet man die Gleichung 4.8 für den Tunnelstrom pro Einheitsfläche als Funktion des Tunnelabstandes d , der Tunnelspannung V und der reziproken Abklinglänge κ , so gilt:

$$I(d, V) = \frac{e^2 \kappa}{2\pi h} \frac{V}{d} e^{-2\kappa d} . \quad (4.19)$$

Hieraus kann nun der normierte Tunnelstrom berechnet werden:

$$\frac{I(d_0, d_1, V_0, V_1, t)}{I_0(d_0, V_0)} = \frac{1 + \frac{V_1}{V_0} \cos(\omega_{V_{mod}}t)}{1 + \frac{d_1}{d_0} \cos(\omega_{SAW}t - \varphi)} e^{-2\kappa d_1 \cos(\omega_{SAW}t - \varphi)} \quad (4.20)$$

Wie im Abschnitt 4.2.1 erklärt, spielt bei dem heterodynischen Meßprinzip der SAW-STM-Methode das Differenzfrequenz-Signal eine entscheidende Rolle. Daher wird nun Gleichung 4.20 so umgeformt, daß sich die spektralen Komponenten des normierten Tunnelstromes ablesen lassen. Mit Hilfe der Potenzreihenentwicklungen $1/(1+x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-x)^n$ und $e^x =$

$\sum_{n=0}^{\infty} x^n/n!$ und mit $\cos(x) = (e^{ix} + e^{-ix})/2$ werden auftretende unendlichen Reihen ausmultipliziert und die Ausdrücke der Form $e^{in\omega_{SAW}}$ zu Cosinus-Funktionen zusammengefaßt:

$$\begin{aligned} \frac{I(d_0, d_1, V_0, V_1, t)}{I_0(d_0, V_0)} = & H(d_0, d_1, 0) \\ & + H(d_0, d_1, 0) \frac{V_1}{V_0} \cos(\omega_{V_{mod}} t) \\ & + \frac{V_1}{V_0} \sum_{n=1}^{\infty} 2H(d_0, d_1, n) \cos[(\omega_{SAW} t - \varphi)] \\ & + \frac{V_1}{V_0} \sum_{n=1}^{\infty} H(d_0, d_1, n) \cos[\omega_{V_{mod}} t + (n\omega_{SAW} t - \varphi)] \\ & + \frac{V_1}{V_0} \sum_{n=1}^{\infty} H(d_0, d_1, n) \cos[\omega_{V_{mod}} t - (n\omega_{SAW} t - \varphi)] \end{aligned} \quad (4.21)$$

Die Koeffizienten $H(d_0, d_1, n)$ lauten:

$$H(d_0, d_1, n) = \begin{cases} \sum_{m=\frac{n}{2}}^{\infty} G(d_0, d_1, 2m) \binom{2m}{m-\frac{n}{2}} & : n \text{ gerade} \\ \sum_{m=\frac{n-1}{2}}^{\infty} G(d_0, d_1, 2m+1) \binom{2m+1}{m-\frac{n-1}{2}} & : n \text{ ungerade} \end{cases} \quad (4.22)$$

wobei gilt

$$G(d_0, d_1, m) = \left(-\frac{d_1}{2d_0}\right)^m \sum_{\nu=0}^m \frac{(2\kappa d_0)^{\nu}}{\nu!} . \quad (4.23)$$

Der normierte Tunnelstrom hat, wie in Gleichung 4.21 zu erkennen ist, neben einem zeitunabhängigen Term Fourierkomponenten bei der Frequenz der SAW, der Tunnelspannungsmodulation und bei den Summen- und Differenzfrequenzen $\omega_{V_{mod}} \pm n\omega_{SAW}$.

Betrachtet wird nun das SAW-STM-Experiment im Constant-Height-Modus, bei dem die Spitze ungeachtet des Tunnelstromes auf der mittleren Tunneldistanz d_0 gehalten wird. Die zeitunabhängige Komponente in Gleichungen 4.21 beschreibt den Einfluß der Abstandsmodulation auf den Gleichstromanteil I_{DC} des Tunnelstromes. Dies kann als Gleichrichtung der Abstandsmodulation an der nicht-linearen Tunnelkennlinie interpretiert werden. Die Gleichungen 4.21 und 4.23 liefern für I_{DC} :

$$\begin{aligned} I_{DC}(d_0, d_1, V_0) = & H(d_0, d_1, 0) I_0(d_0, V_0) \\ = & \sum_{m=0}^{\infty} \left[\binom{2m}{m} \frac{1}{2^{2m}} \sum_{\nu=0}^{2m} \frac{(2\kappa d_0)^{\nu}}{\nu!} \right] \left(\frac{d_1}{d_0}\right)^{2m} I_0(d_0, V_0) \end{aligned} \quad (4.24)$$

Der Gleichstromanteil des Tunnelstromes erfährt durch die Abstandsmodulation also eine Multiplikation mit dem Koeffizienten $H(d_0, d_1, 0)$, dessen Abhängigkeit von d_0 und d_1 in

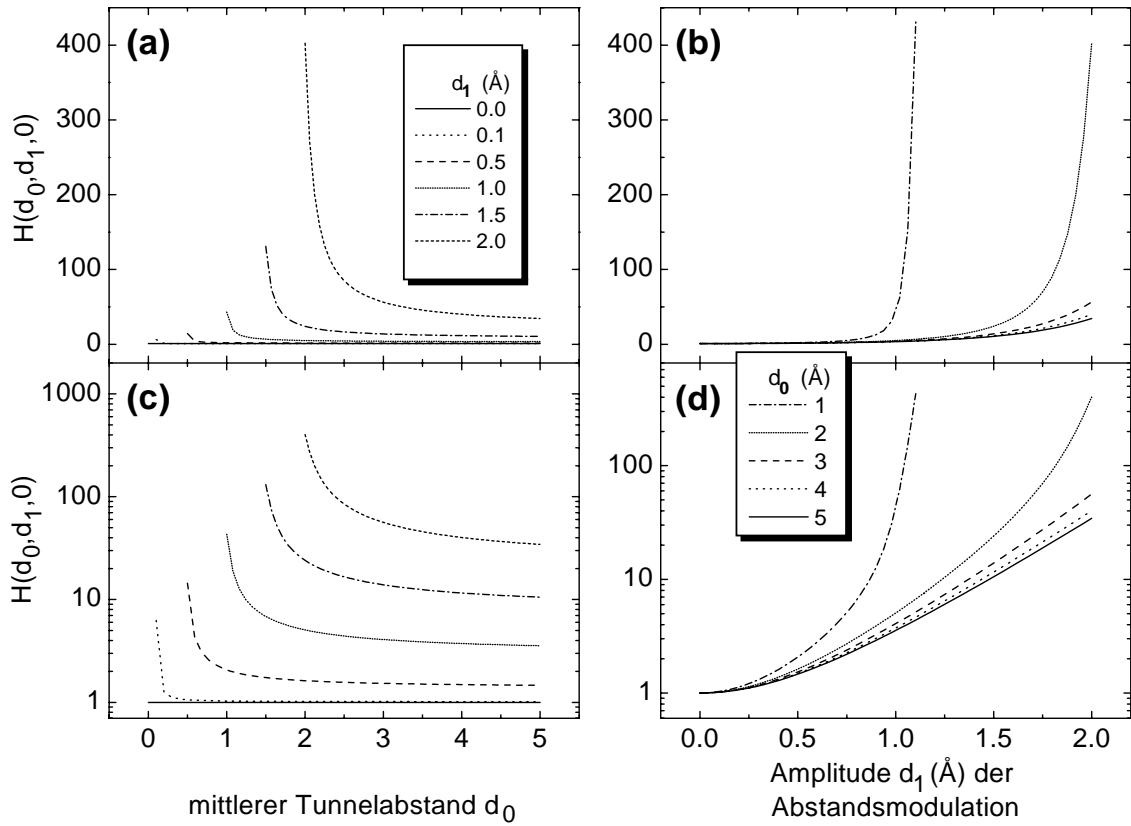


Figure 4.6: Abhängigkeit des Koeffizienten $H(d_0, d_1, 0)$ vom mittleren Tunnelabstand und von der Amplitude der Abstandsmodulation in linearer und logarithmischer Auftragung. $H(d_0, d_1, 0)$ ist das Verhältnis aus dem Gleichstromanteil des Tunnelstromes, der von der akustischen Oberflächenwelle beeinflusst wird, und dem ohne SAW beim selben mittleren Tunnelabstand fließenden Tunnelstrom. Er steigt mit stärker werdender Abstandsmodulation und nimmt mit zunehmendem mittleren Tunnelabstand ab.

Abb. 4.6 dargestellt ist. Da im Fall $d_0 \leq d_1$ die Spitze periodisch in die Probe hineinrammen würde, werden hier nur die Parameterpaare mit $d_0 > d_1$ betrachtet. $H(d_0, d_1, 0)$ fällt monoton mit dem mittleren Tunnelabstand d_0 (Abb. 4.6 (a), (c)) und steigt monoton mit der Amplitude der Abstandsmodulation (Abb. 4.6 (b), (d)). Für kleine d_1 schwindet der Einfluß auf den Gleichstromanteil des Tunnelstromes, $H(d_0, d_1, 0)$ nähert sich dem Wert 1. $H(d_0, d_1, 0)$ hängt im Falle $d_0 \ll d_1$ exponentiell von d_1 ab. Wie an der Steigung der Kurven $H(d_0, d_1, 0)|_{d_1=\text{const}}$ und $H(d_0, d_1, 0)|_{d_0=\text{const}}$ zu erkennen ist, ist im Bereich $d_0 \approx d_1$ die Abhängigkeit $H(d_0, d_1, 0)$ besonders stark. Dies hängt damit zusammen, daß hier der zeitabhängige Tunnelabstand $d(t)$ gemäß Gleichung 4.17 Werte nahe bei Null durchläuft, sich also in einem Bereich befindet, in dem nach Gleichung 4.19 der Tunnelstrom stark vom Tunnelabstand abhängt. Aus der Tatsache, daß $H(d_0, d_1, 0)$ nicht von der Modulation V_1 abhängt, ist zu schließen, daß die Tunnelspannungsmodulation bei der Gleichrichtung der Abstandsmodulation an der nicht-linearen

Tunnelkennlinie keine Rolle spielt.

Der für das SAW-STM-Experiment interessanteste Term in Gleichung 4.21 ist die Fourierkomponente des Tunnelstromes bei der Differenzfrequenz $\Delta\omega = \omega_{V_{mod}} - \omega_{SAW}$, die im folgenden als Differenzfrequenz-Signal $I_{\Delta\omega}$ bezeichnet wird:

$$\begin{aligned}
 I_{\Delta\omega}(d_0, d_1, V_0, V_1) &= \\
 &= \frac{V_1}{V_0} H(d_0, d_1, 1) \cos[(\omega_{V_{mod}} - \omega_{SAW})t - \varphi] I_0(d_0, V_0) \\
 &= -\frac{V_1}{V_0} \sum_{m=0}^{\infty} \left[\binom{2m+1}{m} \frac{1}{2^{2m+1}} \sum_{\nu=0}^{2m+1} \frac{(2\kappa d_0)^\nu}{\nu!} \right] \left(\frac{d_1}{d_0}\right)^{2m+1} \cos(\Delta\omega t - \varphi) I_0(d_0, V_0)
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

Das Differenzfrequenz-Signal ist demnach das Produkt aus dem Koeffizienten $H(d_0, d_1, 1)$, der relativen Tunnelspannungsmodulation V_1/V_0 und dem Tunnelstrom $I_0(d_0, V_0)$ ohne SAW. Für den physikalisch sinnvollen Definitionsbereich $d_1 < d_0$ ist in Abb. 4.7 $H(d_0, d_1, 1)$ aufgetragen. Der physikalischen Erwartung entsprechend, steigt $H(d_0, d_1, 1)$ monoton mit d_1 (Abb. 4.7 (b), (d)). Je größer der mittlere Tunnelabstand d_0 ist, desto geringer ist das Differenzfrequenz-Signal (Abb. 4.7 (a), (c)). Aus demselben Grunde wie bei $H(d_0, d_1, 0)$ hat $H(d_0, d_1, 1)$ die größten Funktionswerte und Steigungen im Bereich $d_0 \approx d_1$.

Entscheidend für das Meßprinzip der SAW-STM-Methode ist, daß nach Gleichung 4.17 das Differenzfrequenz-Signal dieselbe Phase wie die Abstandsmodulation hat. Dies ermöglicht es, über eine phasensensitive Messung — etwa mit einem Lock-In-Verstärker — die Phase φ der Abstandsmodulation zu bestimmen. Dabei wird die Frequenz $\Omega_{V_{mod}}$ der Tunnelspannungsmodulation so gewählt, daß die Differenzfrequenz $\Delta\omega$ innerhalb der Detektionsbandbreite des Lock-In-Verstärkers liegt. Neben der Bestimmung der Phase der Abstandsmodulation besteht das Ziel, aus dem Differenzfrequenz-Signal die Amplitude d_1 der Abstandsmodulation zu extrahieren. Ein einfacher Zusammenhang zwischen der Amplitude² des Differenzfrequenz-Signales in Gleichung 4.25

$$A(d_0, d_1, V_0, V_1) \stackrel{def}{=} -\frac{V_1}{V_0} H(d_0, d_1, 1) I_0(d_0, V_0) \tag{4.26}$$

und d_1 ergibt sich erst in der Näherung für $d_1 < d_0$. In diesem Falle kann die Reihe in Gleichung 4.25 nach dem in d_1 linearen Glied abgebrochen werden:

$$A(d_0, d_1, V_0, V_1) \approx -\frac{1+2\kappa d_0}{2} \frac{V_1}{V_0} \frac{d_1}{d_0} I_0(d_0, V_0) \tag{4.27}$$

In der Näherung für kleine Abstandsmodulationen ist die Amplitude des Differenzfrequenz-Signals somit proportional zur Amplitude d_1 der Abstandsmodulation. Letztere kann also un-

²Da die Amplitude als nicht negative Zahl definiert ist und da $H(d_0, d_1, 1)$ nicht positiv ist, steht auf der rechten Seite der Definitionsgleichung ein Minus-Zeichen.

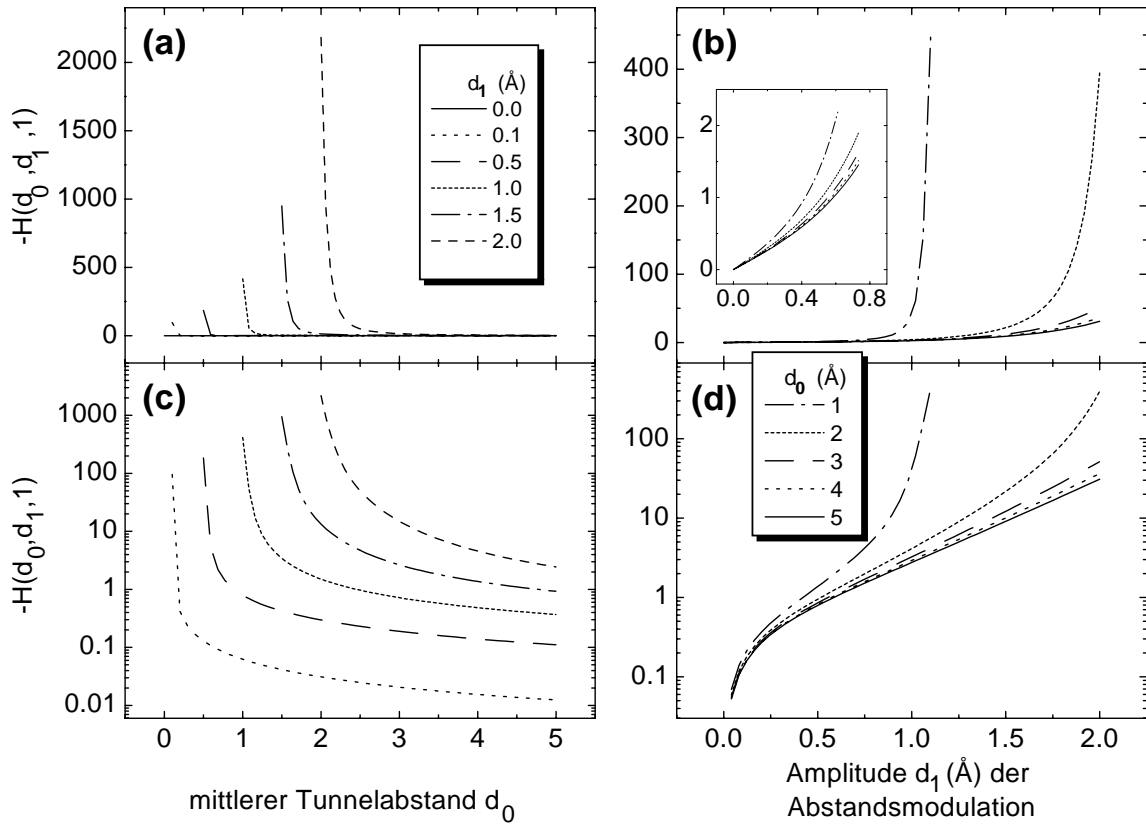


Figure 4.7: Abhängigkeit des Koeffizienten $H(d_0, d_1, 1)$ vom mittleren Tunnelabstand und von der Amplitude der Abstandsmodulation in linearer und logarithmischer Darstellung. $-H(d_0, d_1, 1)$ ist das Verhältnis aus der Amplitude des SAW-STM-Signals beim mittleren Tunnelabstand d_0 und dem bei demselben Tunnelabstand ohne SAW fließenden Tunnelstrom. Die Amplitude nimmt mit steigender Abstandsmodulation zu. Bewegt sich die Spitze von der Probe weg, vermindert sich die Amplitude.

kalibriert durch die Bestimmung der Amplitude des Differenzfrequenz-Signals mit dem Lock-In-Verstärker gemessen werden. Im Constant-Height-Modus trägt das Differenzfrequenz-Signal $I_{\Delta\omega}$ also die volle Phaseninformation der Abstandsmodulation und für kleine d_1 unkalibriert die Information der Amplitude der Abstandsmodulation. Aus diesem Grunde wird $I_{\Delta\omega}$ als das SAW-STM-Signal bezeichnet. Der Ausdruck "Amplitude" kürzt im folgenden die Amplitude des SAW-STM-Signals ab.

4.2.3 Das SAW-STM-Signal im Constant-Current-Modus — Die Theorie

Wegen der thermischen Drift oder bei hoher Oberflächenrauigkeit wird ein Raumtemperatur-STM sinnvollerweise im Constant-Current-Modus betrieben, bei dem die Spitze auf dem Tunnelabstand gehalten wird, so daß sich ein vorgegebener Tunnelstrom einstellt. Da wie oben

diskutiert eine Abstandsmodulation den Gleichstromanteil des Tunnelstromes erhöht, übt im Constant-Current-Modus die SAW einen Einfluß auf den mittleren Tunnelabstand aus. Um diesen komplizierenden Effekt zu berücksichtigen, wird im folgenden ein Gedankenexperiment durchgeführt. Die mittlere Tunnelspannung V_0 und die Amplitude V_1 der Tunnelspannungs-Modulation werden konstant gehalten.

1. *Schritt:* Das STM wird ohne SAW im Constant-Height-Modus betrieben. Aus dem Tunnelabstand d_{0ch} errechnet sich der Tunnelstrom zu:

$$I_0(d_{0ch}, V_0) = \frac{e^2 \kappa}{2\pi h} \frac{V_0}{d_{0ch}} e^{-2\kappa d_{0ch}} \quad (4.28)$$

2. *Schritt:* Bei vorliegender SAW wird im Constant-Height-Modus der Tunnelabstand d_{0ch} konstant gehalten. d_1 sei die Amplitude der resultierenden Abstandsmodulation. Nach Gleichung 4.24 steigt der Gleichstromanteil des Tunnelstromes um den Faktor $H(d_{0ch}, d_1, 0)$:

$$I_{DC, d_1}(d_{0ch}, d_1) = H(d_{0ch}, d_1, 0) I_0(d_{0ch}) \quad (4.29)$$

3. *Schritt:* Bei weiterhin bestehender SAW wird das STM in den Constant-Current-Modus geschaltet; als Soll-Tunnelstrom wird der Tunnelstrom $I_0(d_{0ch})$ (Gleichung 4.28) beim Abstand d_{0ch} ohne SAW gewählt. Damit der Gleichstromanteil des Tunnelstromes gleich dem Sollstrom ist, vergrößert die Abstandsregelung den Tunnelabstand auf den Wert d_{0cc} , so daß gilt:

$$\begin{aligned} I_0(d_{0ch}, V_0) &= I_{DC}(d_{0cc}, d_1, V_0) \\ &= H(d_{0cc}, d_1, 0) I_0(d_{0cc}, V_0) \end{aligned} \quad (4.30)$$

Hierbei ist $I_0(d_{0cc}, V_0) = (e^2 \kappa V_0) / (2\pi h d_{0cc}) e^{-2\kappa d_{0cc}}$ der Tunnelstrom ohne SAW beim Tunnelabstand d_{0cc} . d_{0ch} wird als äquivalenter Tunnelabstand bezeichnet, weil sich dieser Tunnelabstand im Constant-Current-Modus ohne SAW einstellen würde. Da sich keine analytisch geschlossene Form für die unendliche Reihe $H(d_{0cc}, d_1, 0)$ finden ließ, konnte die Gleichung 4.30 nicht nach d_{0cc} aufgelöst werden. Stattdessen wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Programm geschrieben, das numerisch für gegebene Parameter d_{0ch} und d_1 den von der SAW beeinflussten mittleren Tunnelabstand

$$d_{0cc} = d_{0cc}(d_{0ch}, d_1) \quad (4.31)$$

berechnet. Da sich V_0 auf beiden Seiten der Gleichung 4.30 herauskürzt, hängt d_{0cc} nur von d_{0ch} und d_1 ab. Da der Zusammenhang 4.31 nur tabellarisch bekannt ist, können die Eigenschaften der nun zu diskutierenden Größen d_{0cc} und A nicht anhand analytisch geschlossener Gleichungen hergeleitet werden, sondern müssen aus x-y-Graphen empirisch geschlossen werden.

Die Amplitude A und der mittlere Tunnelabstand d_{0cc} sind in Abb. 4.8 als Funktion des äquivalenten Tunnelabstandes und des Gleichstromanteils I_{DC} des Tunnelstromes dargestellt.

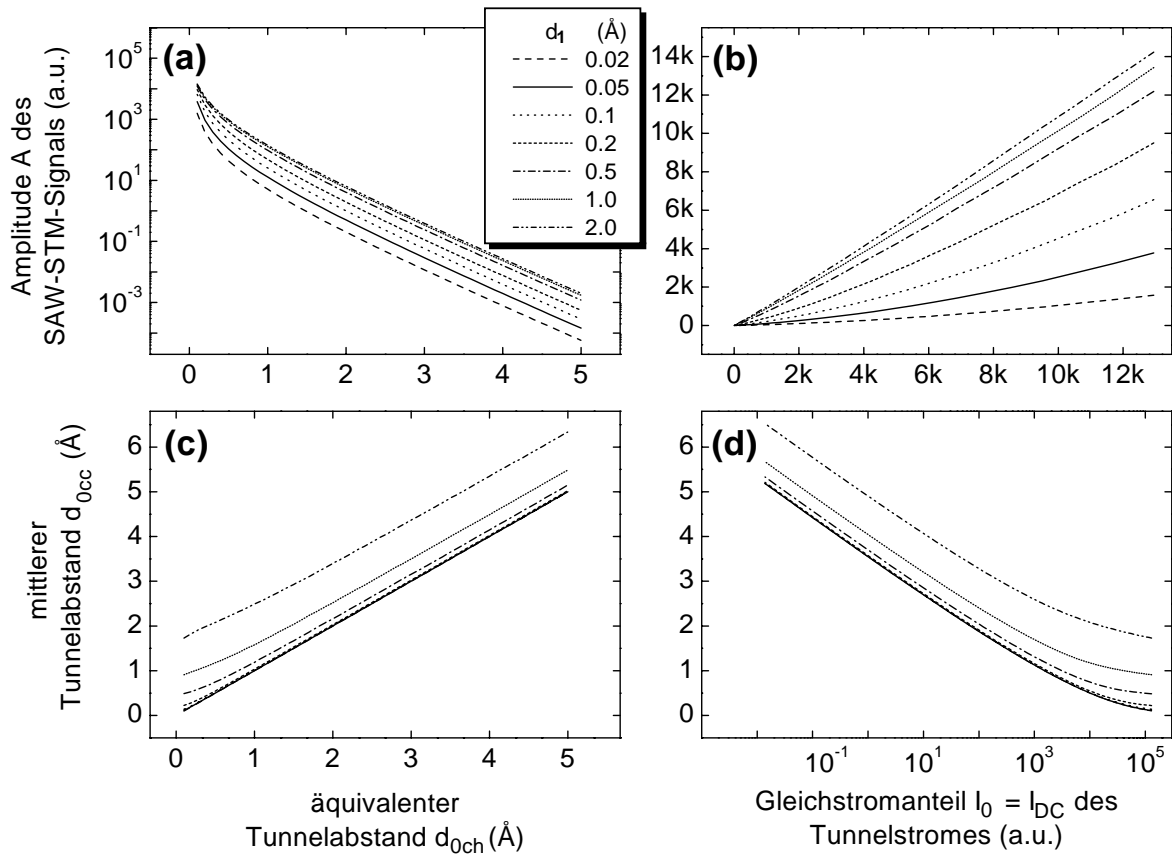


Figure 4.8: Verhalten der Amplitude des SAW-STM-Signals und des mittleren Tunnelabstandes bei Änderung des Soll-Tunnelstromes im Constant-Current-Modus. Definitionsgemäß ist der in Abwesenheit einer SAW beim äquivalenten Tunnelabstand d_{0ch} fließende Tunnelstrom gleich dem Gleichstromanteil I_{DC} des Tunnelstromes in Anwesenheit einer SAW. (a) Die Amplitude nimmt für nicht zu kleine d_{0ch} exponentiell mit dem äquivalenten Tunnelabstand ab. (b) Die Amplitude steigt leicht linksgekrümmt mit I_{DC} an. Das k kürzt den Faktor 1000 ab. (c) Aufgrund der SAW ist der mittlere Tunnelabstand um einen annähernd konstanten Betrag größer als der äquivalente Tunnelabstand. (d) Für nicht zu große I_{DC} nimmt der mittlere Tunnelabstand linear mit dem Logarithmus von I_{DC} ab.

Der mittlere Tunnelabstand als Funktion des äquivalenten Tunnelabstandes. Abb. 4.8 (c) verdeutlicht für unterschiedliche Amplituden d_1 der Abstandsmodulation die Abhängigkeit des mittleren Tunnelabstandes d_{0cc} vom äquivalenten Tunnelabstand d_{0ch} , der im realen Experiment im allgemeinen nicht bekannt ist, aber über den Soll-Tunnelstrom eingestellt wird. Für $d_1 = 0$ gilt trivialerweise $d_{0cc} = d_{0ch}$. Für $d_{0ch} > 1$ Å wird zu d_{0ch} lediglich eine Konstante addiert, die monoton mit d_1 steigt, so daß sich eine Schar von Geraden der Steigung 1 ergibt. Eine Abweichung von diesem linearen Verhalten ist nur bei kleinen äquivalenten Tunnelabständen $d_{0ch} < 1$ Å zu verzeichnen. Dies hängt mit der Polstelle der von Gleichung 4.19 beschriebenen Abstandsabhängigkeit zusammen. Die Spitze rückt im Constant-Current-Modus beim Einschalten der SAW von der Probe ab, um den SAW-induzierten Anstieg der Gleichstromkom-

ponente des Tunnelstromes auszugleichen.

Der mittlere Tunnelabstand als Funktion des Tunnelstromes. Da im realen SAW-STM-Experiment der Soll-Tunnelstrom $I_{DC}(d_{0cc}, d_1, V_0) = I_0(d_{0ch}, V_0)$ und nicht der äquivalente Tunnelabstand d_{0ch} bekannt ist, wird nun die funktionale Abhängigkeit des mittleren Tunnelabstandes d_{0cc} vom I_0 diskutiert:

$$d_{0cc} = d_{0cc}(d_{0ch}(I_0, V_0), d_1) \quad (4.32)$$

Diese in Abb. 4.8 (d) dargestellte Abhängigkeit ist inhaltlich der Funktion $d_{0cc} = d_{0cc}(d_{0ch}, d_1)$ äquivalent, weil hier über die Abstandsabhängigkeit des Tunnelstromes in Gleichung 4.19 lediglich die x-Achse umskaliert wurde. Da die Abstandsabhängigkeit für nicht zu kleine Tunnelabstände einen exponentiell abklingenden Verlauf hat, entspricht die in Abb. 4.8 (d) erfolgte logarithmische Auftragung des Tunnelstromes $I_0(d_{0ch}, V_0)$ für nicht zu große $I_0(d_{0ch}, V_0)$ einer seitenverkehrten Auftragung von d_{0ch} . Daher ist eine mit dem Logarithmus des Tunnelstromes $I_0(d_{0ch}, V_0)$ lineare Abnahme des mittleren Tunnelabstandes d_{0cc} zu verzeichnen. Diese Abnahme ist bei großen Tunnelströmen verringert. Eine Änderung der Amplitude d_1 der Abstandsmodulation bewirkt eine vertikale Parallelverschiebung dieser Kurve. Mit gegen Null strebendem d_1 schmiegen sich die Kurven der Umkehrfunktion der Abstandsabhängigkeit (Gleichung 4.19) an. Dieses Verhalten ist verständlich, weil im Falle $d_1 = 0$ das von Simmons beschriebene Tunneln ohne SAW vorliegt.

Die Abhängigkeit des mittleren Tunnelabstandes von der Amplitude der Abstandsmodulation. In den Abbildungen 4.9 (c) und (d) ist der mittlere Tunnelabstand d_{0cc} für verschiedene äquivalente Tunnelabstände d_{0ch} als Funktion der Amplitude d_1 der Abstandsmodulation aufgetragen. Für $d_1 = 0$, also in Abwesenheit einer Abstandsmodulation, gilt erwartungsgemäß $d_{0cc} = d_{0ch}$. d_{0cc} steigt monoton mit d_1 , da bei konstant gehaltenem Tunnelabstand der Gleichstromanteil des Tunnelstromes mit wachsendem d_1 zunimmt. Um den Tunnelstrom konstant zu halten, muß die Abstandsregelung die Spitze daher umso weiter zurückziehen, je größer d_1 ist. Von besonderem Interesse ist der minimale während einer SAW-Periode auftretende Abstand (kurz Minimalabstand)

$$d_{min}(d_{0ch}, d_1) \stackrel{def}{=} d_{0cc}(d_{0ch}, d_1) - d_1 \quad (4.33)$$

zwischen Spitze und Probe. Die Abbildungen 4.9 (c) und (d) lassen in dem dargestellten d_1 -Intervall keine Rückschlüsse auf das Verhalten des Minimalabstandes bei großen d_1 zu. Im Falle $\lim_{d_1 \rightarrow \infty} d_{min} > 0$ zieht bei steigendem d_1 die Abstandsregelung die Spitze derart zurück, daß der Tunnelabstand während einer SAW-Periode ein positives Minimum nicht unterschreitet. In diesem Fall würde $d_{0cc}(d_{0ch}, d_1)$ die Winkelhalbierende $d_{0cc}(d_{0ch}, d_1) = d_1$ weder schneiden, noch würde sie sich ihr asymptotisch annähern. Prinzipiell denkbar ist aber auch, daß die Ausgleichsbewegung der Spitze das Anwachsen von d_1 nicht ausgleichen kann und d_{min} negativ wird. Dann würde $d_{0cc}(d_{0ch}, d_1)$ die Winkelhalbierende schneiden und ab einem

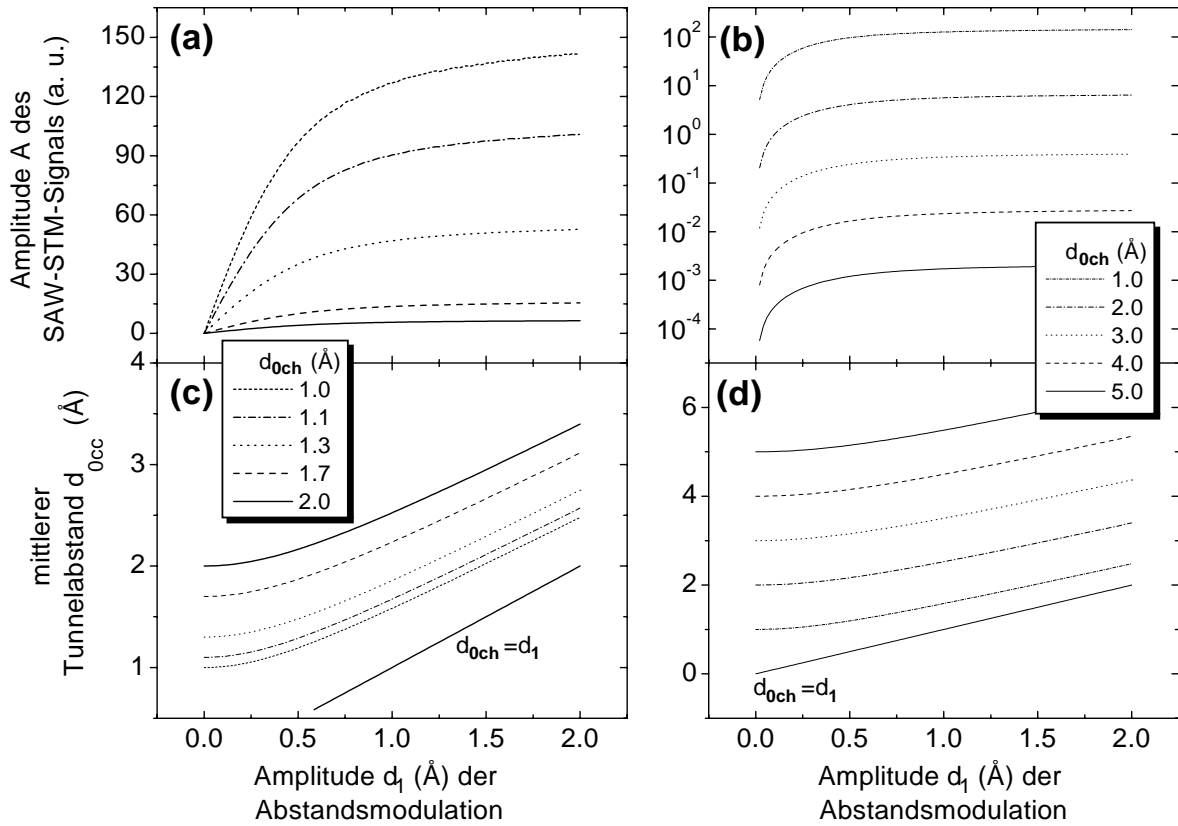


Figure 4.9: Abhängigkeit der Amplitude des SAW-STM-Signals und des mittleren Tunnelabstandes d_{0cc} von der Amplitude d_1 der Abstandsmodulation im Constant-Current-Modus. (a), (b) Für kleine d_1 steigt die Amplitude des SAW-STM-Signals linear mit der Amplitude d_1 der Abstandsmodulation; ohne in Sättigung zu gehen, weist die Amplitude mit steigendem d_1 eine Rechtskrümmung auf. (c), (d) Bei steigendem d_1 zieht die Abstandsregelung die Spitze so zurück, daß der mittlere Tunnelabstand größer als d_1 ist und ein mechanischer Kontakt zwischen Spitze und Probe also verhindert wird.

bestimmten d_1 würde die Probe mit der Frequenz der SAW die Spitze anstoßen. Wie im Anhang A gezeigt wird, gilt jedoch

$$\lim_{d_1 \rightarrow \infty} d_{min}(d_{0ch}, d_1) = 0, \quad (4.34)$$

mit steigendem d_1 geht der Minimalabstand also gegen Null; $d_{0cc}(d_{0ch}, d_1)$ nähert sich der Winkelhalbierenden also asymptotisch. Die Abstandsregelung sorgt beim im Constant-Current-Modus durchgeführten SAW-STM-Experiment also dafür, daß die oszillierende Probenoberfläche niemals die Spitze berührt. Gleichzeitig läßt sie aber zu, daß die Probe der Spitze mit steigender Amplitude der Abstandsmodulation beliebig nahe kommt. Dies impliziert, daß bei hohen d_1 während einer SAW-Periode der Tunnelstrom $I(d_0, d_1, V_0, V_1, t)$ sehr hohe Werte durchläuft. Daher ist in diesem Fall ein experimentell beobachtbares insta-

biles Signal zu erwarten. Dieses Verhalten wird im folgenden als "asymptotischer Tip-Crash" bezeichnet. Es impliziert, daß sich der maximale während einer SAW-Periode auftretende Tunnelabstand (kurz Maximalabstand) für große d_1 dem Wert $2d_1$ nähert.

Die Abhängigkeit des Tunnelabstandes von der Amplitude der Abstandsmodulation im Constant-Current-Modus übt einen signifikanten Einfluß auf das SAW-STM-Signal aus. Die resultierende funktionale Abhängigkeit des SAW-STM-Signals vom Soll-Tunnelstrom und von der Amplitude der Abstandsmodulation, die im folgenden hergeleitet wird, unterscheidet sich deutlich gegenüber den Resultaten für den Constant-Height-Modus. Mit den Gleichungen 4.25 und 4.28 läßt sich die Amplitude des SAW-STM-Signals im Constant-Current-Modus berechnen, die, wie sich ergibt, nicht von der mittleren Tunnelspannung V_0 , sondern nur vom äquivalenten Tunnelabstand d_{0ch} abhängt:

$$\begin{aligned} A(d_{0cc}, d_1, V_1) &= \frac{V_1}{V_0} H(d_{0cc}, d_1, 1) I_0(d_{0cc}, V_0) \\ &= V_1 H(d_{0cc}, d_1, 1) \frac{e^2 \kappa}{2\pi h} \frac{e^{-2\kappa d_{0cc}}}{d_{0cc}} \end{aligned} \quad (4.35)$$

Dieser vom Constant-Height-Modus bekannte funktionale Zusammenhang ist wenig aussagekräftig, weil im Constant-Current-Modus d_{0cc} selber von d_1 abhängig ist:

$$A(d_{0cc}(d_{0ch}, d_1), d_1, V_1) = \frac{V_1}{V_0} H(d_{0cc}(d_{0ch}, d_1), d_1, 1) I_0(d_{0cc}(d_{0ch}, d_1), V_0) \quad (4.36)$$

Die Abhängigkeit der Amplitude vom äquivalenten Tunnelabstand. Wie in Abb. 4.8 (a) zu erkennen ist, nimmt die Amplitude exponentiell mit dem äquivalenten Tunnelabstand d_{0ch} ab, sofern gilt $d_{0ch} > 1$. Die Steigung beträgt etwa -1.3 Dekaden pro 1 Å. Für $d_{0ch} < 1$ nimmt die Steigung der Amplitude mit fallendem d_{0ch} zu, was mit dem vom exponentiellen Verlauf abweichenden Tunnelstrom bei kleinen Tunnelabständen zusammenhängt. Da die Amplitude A mit d_1 ansteigt, liegen die Kurven $A(d_{0ch})|_{d_1=const}$ umso höher, je größer d_1 ist.

Die Abhängigkeit der Amplitude vom Tunnelstrom. Wie oben bereits erwähnt, ist im realen SAW-STM-Experiment der äquivalente Tunnelabstand unbekannt und wird über die Wahl des Soll-Tunnelstromes I_0 , der gleich dem Gleichstromanteil I_{DC} des Tunnelstrom-Signals ist, eingestellt. Von Interesse ist daher die Abhängigkeit der Amplitude des SAW-STM-Signals von I_0 , wenn die mittlere Tunnelspannung konstant gehalten wird:

$$\begin{aligned} A(d_{0cc}(d_{0ch}(I_0, V_0), d_1), d_1, V_1) &= \frac{V_1}{V_0} H(d_{0cc}(d_{0ch}(I_0, V_0), d_1), d_1, 1) \\ &\quad \times I_0(d_{0cc}(d_{0ch}(I_0, V_0), d_1)) \end{aligned} \quad (4.37)$$

Die in Abb. 4.8 (b) gezeichneten numerisch errechneten Kurven $A(I_0)|_{d_1=const}$ zeigen, daß die Amplitude monoton mit I_0 ansteigt. Um dies zu erklären, muß die Gleichung 4.35 betra-

chtet werden. An Gleichung 4.25 ist abzulesen, daß $H(d_{0cc}, d_1, 1)$ monoton mit fallendem d_{0cc} wächst. Dies gilt auch für $I_0(d_{0cc}, V_0)$, so daß auch die Amplitude gemäß Gleichung 4.35 mit fallendem d_{0cc} ansteigt. Da der Tunnelabstand d_{0cc} im Constant-Current-Modus bei einer Erhöhung des Sollstromes abnimmt, steigt somit gleichzeitig die Amplitude A . Es läßt sich für kleine Ströme I_0 ein linearer Anstieg erkennen, der von d_1 abhängig in eine leichte Linkskrümmung übergeht.

Die Abhängigkeit der Amplitude des SAW-STM-Signals von der Amplitude der Abstandsmodulation. Die Amplitude des SAW-STM-Signals $A(d_1) |_{d_{0ch}=const}$ als Funktion der Amplitude der Abstandsmodulation ist in Abb. 4.9 (a) und (b) dargestellt. Bei geringem d_1 ist ein linearer Anstieg der Amplitude A zu verzeichnen, der sich mit steigendem d_1 verlangsamt, so daß die eingezeichneten Kurven $A(d_1) |_{d_{0ch}=const}$ rechtsgekrümmt sind. Eine einfache, mathematisch exakte Untersuchung des Verhaltens der Amplitude bei hohen d_1 wurde wegen der Komplexität der auftretenden Gleichungen nicht unternommen. Stattdessen seien folgende qualitative Aspekte erwähnt:

Wegen des Phänomens des asymptotischen Tip-Crash, kommt bei starken Abstandsmodulationen die Probe der Spitze beliebig nahe, und der Maximalabstand ist proportional zu d_1 . Der Tunnelstrom pendelt während einer SAW-Periode also zwischen einem Minimum, das für große d_1 zu Null genähert werden kann, und einem Maximum, das über alle Grenzen mit steigendem d_1 ansteigt. Da also der Modulationshub des Tunnelstromes mit d_1 beliebig hoch wird, ist zu erwarten, daß die Amplitude des SAW-STM-Signals trotz der offensichtlichen Rechtskrümmung der Kurven $A(d_1) |_{d_{0ch}=const}$ auch über alle Grenzen wächst und sich nicht asymptotisch einem Wert nähert.

Die Separationsnäherung der Amplitude. Die funktionale Abhängigkeit der Amplitude von der Amplitude der Abstandsmodulation hat eine erfreuliche Eigenschaft, die es ermöglicht, aus Meßreihen $A(d_1)$, bei denen weder d_1 noch die Amplitude A kalibriert gemessen wurden, die Amplitude der Abstandsmodulation kalibriert zu bestimmen. Da die Abhängigkeit $A(d_{0cc}, d_1, V_0)$ nicht in einer analytisch geschlossenen Form gegeben ist, wird diese Eigenschaft im folgenden empirisch aus den simulierten Daten geschlossen. In der Abbildung 4.8 (a) ist ersichtlich, daß für $d_{0ch} > 2 \text{ \AA}$ die Kurven $\log A(d_{0ch}) |_{d_1=const}$ für unterschiedliche d_1 parallele Geraden sind. Zur genaueren Analyse sind in Abb. 4.10 die durch $A(d_{0ch}) |_{d_1=2.0 \text{ \AA}}$ geteilten Kurven $A(d_{0ch}) |_{d_1=const}$ aufgetragen. Man sieht, daß die so normierten Amplitudenkurven für äquivalente Tunnelabstände $d_{0ch} > 2 \text{ \AA}$ nur noch unwesentlich von d_{0ch} abhängen. Hieraus folgt, daß sich für $d_{0ch} > 2 \text{ \AA}$ die Kurven $A(d_1) |_{d_{0ch}=const}$ nur um einen von d_{0ch} abhängigen Vorfaktor unterscheiden. Die Gleichung 4.36 für die Amplitude kann also für $d_{0ch} > 2 \text{ \AA}$ näherungsweise in der Form eines Separationsansatzes geschrieben werden:

$$A(d_{0cc}(d_{0ch}, d_1), d_1, V_1) = V_1 B(d_{0ch}) D(d_1) , \quad (4.38)$$

wobei $B(d_{0ch})$ als die Abstandsfunction und $D(d_1)$ als die Abstandsmodulationsfunction bezeichnet wird. Man beachte, daß $D(d_1)$ und $B(d_{0ch})$ durch die Gleichung 4.38 nur bis auf

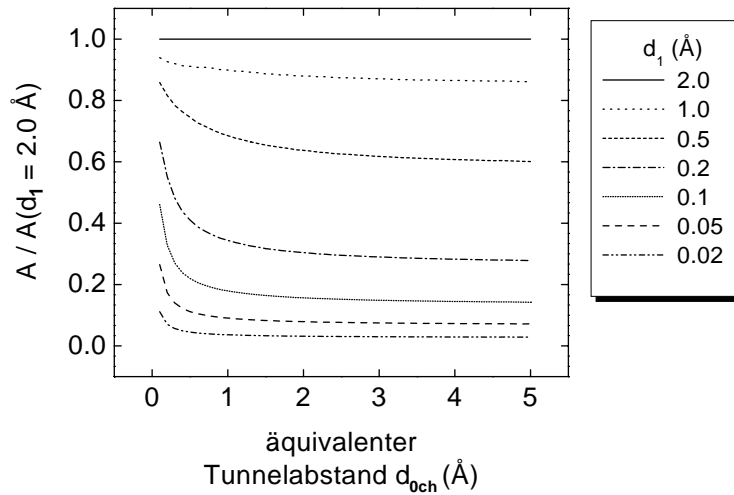


Figure 4.10: Analyse zur Abstandsabhängigkeit der Amplitude zur Herleitung der Separationsnäherung. Eingezeichnet sind die simulierten Kurven $A(d_{0ch})|_{d_1=const}$, die durch $A(d_{0ch})|_{d_1=2.0 \text{ Å}}$ geteilt wurden. Die empirische Feststellung, daß für $d_{0ch} > 2 \text{ Å}$ die sich ergebenden Kurven vom äquivalenten Tunnelabstand d_{0ch} näherungsweise unabhängig sind, führt zur Separationsnäherung der Amplitude.

einen Vorfaktor bestimmt sind, weil in Gleichung 4.38 nur das Produkt $B(d_{0ch}) D(d_1)$ festgelegt ist. Das auf dieser Separationsnäherung beruhende Verfahren zur Absolutkalibrierung der Amplitude der Abstandsmodulation wird im Abschnitt 7.3.1 beschrieben.

Der Einfluß der Spannungsmodulation auf den mittleren Tunnelabstand und die Amplitude. Da die Amplitude V_1 der Spannungsmodulation in der Bestimmungsgleichung 4.30 des mittleren Tunnelabstandes d_{0cc} weder explizit noch implizit auftritt, ist d_{0cc} von V_1 unabhängig. In der Gleichung 4.36, die die Amplitude beschreibt, tritt V_1 nur explizit als Faktor auf und hat keinen Einfluß auf die anderen auftretenden Parameter d_{0ch} , d_{0cc} und d_1 . Folglich ist die Amplitude proportional zur Amplitude der Spannungsmodulation. Da im Rahmen dieser Theorie keine Beschränkung der Größe von V_1 angenommen wurde, gilt diese Proportionalität auch, wenn V_1 größer als V_0 ist, der zeitabhängige Tunnelspannung $V(t)$ gemäß Gleichung 4.18 also negative Werte durchläuft.

Der Einfluß der mittleren Tunnelspannung auf den mittleren Tunnelabstand. Wurde in bisherigen Betrachtungen die mittlere Tunnelspannung V_0 als konstant angenommen, so wird nun der Einfluß der Tunnelspannung auf den mittleren Tunnelabstand und die Amplitude diskutiert. Dazu wird dem Gedankenexperiment vom Beginn dieses Abschnittes ein weiterer Schritt hinzugefügt:

4. *Schritt:* Bei angeschalteter SAW wird das STM weiterhin im Constant-Current-Modus betrieben, der Soll-Tunnelstrom beibehalten, aber die mittlere Tunnelspannung V_0 verändert. Der äquivalente Tunnelabstand ändert sich derart, daß der Tunnelstrom konstant bleibt, ist

also eine Funktion von V_0 :

$$d_{0ch} = d_{0ch}(I_0, V_0) , \quad (4.39)$$

wobei gilt: $I_0(d_{0ch}(I_0, V_0), V_0) = \text{const.}$ Die Bestimmungsgleichung 4.30 des mittleren Tunnelabstandes d_{0cc} lautet hiermit:

$$I_0(d_{0ch}(I_0, V_0), V_0) = H(d_{0cc}, d_1, 0) I_0(d_{0cc}, V_0) = \text{const} \quad (4.40)$$

Ebenso wie die Bestimmungsgleichung 4.30 für konstante V_0 wurde diese Gleichung nach d_{0cc} numerisch aufgelöst. Die sich ergebende Funktion $d_{0cc} = d_{0cc}(d_{0ch}(I_0, V_0), d_1, V_0)$ ist für verschiedene Amplituden d_1 der Abstandsmodulation und konstanten DC-Tunnelstrom I_0 in Abb. 4.11 dargestellt. Es ist ersichtlich, daß d_{0cc} monoton mit V_0 steigt. Dieses Verhalten läßt sich aus der Gleichung 4.40 herleiten, indem man berücksichtigt, daß $I_0(d_{0cc}, V_0)$ monoton mit V_0 steigt, und $H(d_{0cc}, d_1, 0)$ monoton mit d_{0cc} fällt.

Der Einfluß der mittleren Tunnelspannung auf die Amplitude. Hängt der mittlere Tunnelabstand gemäß Gleichung 4.11 von der mittleren Tunnelspannung V_0 ab, dann nimmt die die Amplitude beschreibende Gleichung 4.35 die Form

$$\begin{aligned} A(d_{0cc}(d_{0ch}(I_0, V_0), d_1), d_1, V_1) &= \frac{V_1}{V_0} H(d_{0cc}(d_{0ch}(I_0, V_0), d_1), d_1, 1) \\ &\times I_0(d_{0cc}(d_{0ch}(I_0, V_0), d_1)) \end{aligned} \quad (4.41)$$

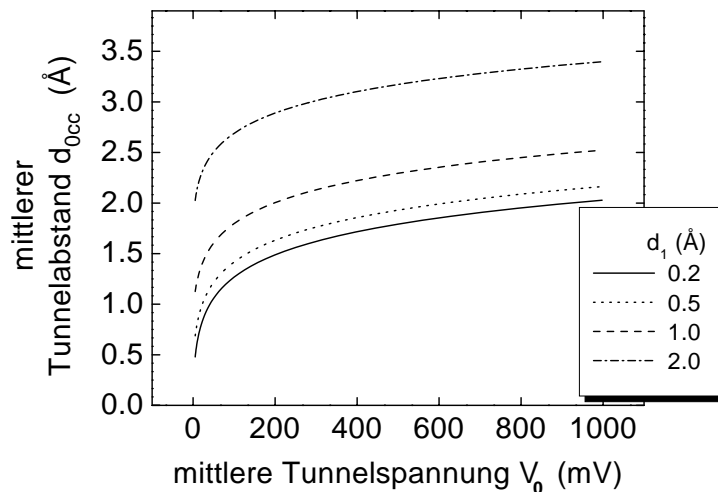


Figure 4.11: Die Abhängigkeit des mittleren Tunnelabstandes von der mittleren Tunnelspannung. Wird im Constant-Current-Modus bei vorliegender SAW die mittlere Tunnelspannung erhöht, zieht sich die Spitze von der Probe zurück.

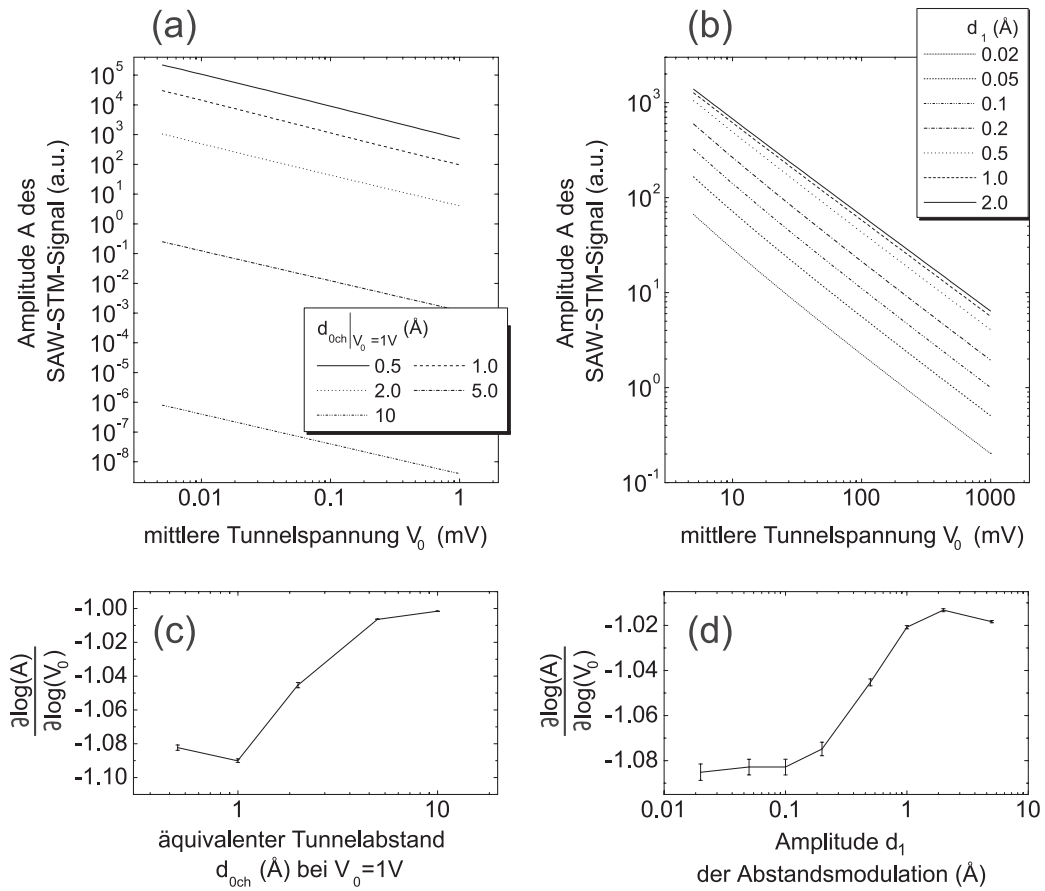


Figure 4.12: Das Verhalten der Amplitude bei Änderung der mittleren Tunnelspannung. Bei der Simulation der Abhängigkeit der Amplitude von der mittleren Tunnelspannung wurden als Parameter in (a) der äquivalente Tunnelabstand $d_{0ch}|_{V_0=1V}$ und in (b) die Amplitude d_1 der Abstandsmodulation variiert. Die doppellogarithmische Auftragung liefert Geraden, deren Steigung in (c) und (d) dargestellt sind.

an. Die Amplitude ist also zu $\frac{1}{V_0}$ proportional, hängt aber auch implizit von V_0 ab. Um diese Abweichung von der Proportionalität zu $1/V_0$ zu untersuchen, wurde anhand der Gleichung 4.41 die Amplitude als Funktion von V_0 simuliert und in Abb. 4.12 doppellogarithmisch dargestellt. Dies geschah für unterschiedliche Werte für den äquivalenten Tunnelabstand $d_{0ch}|_{V_0=1V}$ bei der Tunnelspannung V_0 (Abb. 4.12 (a)) und für unterschiedliche Amplituden der Abstandsmodulation d_1 (Abb. 4.12 (b)). Der äquivalente Tunnelabstand bei der konstanten Tunnelspannung V_0 parametrisiert hier den Soll-Tunnelstrom I_0 , der ohnehin nur in willkürlichen Einheiten angegeben werden kann. Der Bereich der gewählten $d_{0ch}|_{V_0=1V}$ und d_1 wurde so gewählt, daß er die in der Realität typischerweise vorkommenden Werte erfaßt. Es ergeben sich Geraden, deren Steigung nur geringfügig von $d_{0ch}|_{V_0=1V}$ (Abb. 4.12 (c)) und von d_1 (Abb. 4.12 (d)) abhängen. Die mittlere Steigung $\partial \log(A)/\partial \log V_0$ beträgt -1.05, wobei die maximale Abweichung im Bereich der Parameter $d_{0ch}|_{V_0=1V}$ und d_1 5% beträgt. Vernachlässigt man diesen geringen Einfluß von $d_{0ch}|_{V_0=1V}$ und d_1 auf die Steigung $\partial \log(A)/\partial \log V_0$, dann

läßt sich die Gleichung 4.41 zu

$$A(d_{0cc}(d_{0ch}(I_0, V_0), d_1), d_1, V_1) = \frac{V_1}{V_0^{1.05}} R(I_0, d_1) \quad (4.42)$$

umschreiben, wobei die Funktion R nur vom konstant gehaltenen Tunnelstrom I_0 und von d_1 abhängt. Ist der äquivalente Tunnelstrom d_{0ch} , der sich gemäß $I_0(d_{0ch}, V_0) = \text{const}$ aus I_0 und V_0 berechnet größer als 2 Å, dann kann auf die Gleichung 4.42 die Separationsnäherung angewendet werden:

$$A(d_{0cc}(d_{0ch}(I_0, V_0), d_1), d_1, V_1) = \frac{V_1}{V_0^{1.05}} L(I_0) D(d_1) \quad (4.43)$$

Mit den Gleichungen 4.42 und 4.43 sind genäherte Ausdrücke für die Amplitude gefunden worden, mit denen der Einfluß der im Experiment eingestellten Parameter auf die Amplitude weitgehend aufgeschlüsselt worden ist. Es sei abschließend daran erinnert, daß es wegen der Definitionen 4.22 der Koeffizienten $H(d_0, d_1, 0)$ und $H(d_0, d_1, 1)$ nicht möglich war, analytisch geschlossenen Ausdrücke für den mittleren Tunnelabstand d_{0ch} und die Amplitude zu finden. Daher wurden mit eigens erstellten Programmen die Abhängigkeit von d_{0ch} und der Amplitude von Parametern d_{0ch} , I_0 , d_1 , V_1 und V_0 numerisch bestimmt. Anschließend wurden diese Abhängigkeiten empirisch anhand von Darstellungen in Koordinatensystem ausgewertet und mathematisch formuliert. Es ist damit im Rahmen dieser Arbeit gelungen, auf Basis der vorgefundenen Theorie des SAW-STM-Signals im Constant-Height-Modus eine Theorie zu entwickeln, die das SAW-STM-Signal beim im Experiment meist verwendeten Constant-Current-Modus beschreibt. Diese Theorie wird im Abschnitt 7.3 hinsichtlich vieler hier diskutierten funktionaler Abhängigkeiten einer experimentellen Überprüfung unterzogen.

4.3 Das SAW-STM-Signal auf der korrigierten Oberfläche

In den Kapiteln 4.2.2 und 4.2.3 wurde beschrieben, wie das SAW-STM-Signal durch Mischung der Modulationen des Tunnelabstandes und der Tunnelspannung an der nicht-linearen Tunnelkennlinie das SAW-STM-Signal entsteht. Dabei wurden die Amplitude d_1 und Phase φ der Abstandsmodulation $d(t) = d_0 + d_1 \cos[\omega_{SAW}t - \varphi]$ als vorgegeben betrachtet. In diesem Abschnitt soll nun dargestellt werden, wie die Korrigation der Probenoberfläche und ihre Wellenbewegung die Abstandsmodulation und somit das SAW-STM-Signal beeinflussen. Es wird eine Herleitung für diese funktionelle Abhängigkeit vorgestellt, die im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde und die zu dem Ergebnis des von H.-J. Fröhlich [35] veröffentlichten Modells führt.

4.3.1 Das SAW-STM-Signal als Funktion der Oszillationsbahn und der Oberflächenneigung

Im Falle einer korrigierten Oberfläche kann das Tunneln nicht ohne Änderungen mit den Modellen von Chen und Simmons (Abschnitte 4.1.1 und 4.1.2) beschrieben werden, in denen die Probe und die Spitze durch planare Metallelektroden ersetzt werden. In der hier vorzustellenden Theorie wird die Probe als idealer Leiter angesehen, der ohne Übergang zum Vakuum von der Probenoberfläche $z = z(x, y)$ begrenzt wird. Die quantenmechanische Beschreibung der Probenoberfläche durch die lokale Zustandsdichte $\rho(\mathbf{r}, E)$, die bei der Theorie von Tersoff und Hamann 4.1.3 zum Tragen kommt, wird also nicht angewendet. Um der dreidimensionalen Probengeometrie Rechnung zu tragen, geht das hier verwendete Modell davon aus, daß sich die Tunnelelektronen nur auf dem kürzesten Weg zwischen der punktförmig gedachten Spitze und der Probe bewegen.³ Der Tunnelpfad ist also die Normale der Probenoberfläche, die die Spitze trifft. Auf den somit definierten Tunnelabstand wird dann die Tunnelcharakteristik Gleichung 4.8 angewendet, so daß die in den Kapiteln 4.2.2 und 4.2.3 vorgestellten Theorien ihre Gültigkeit behalten.

Läuft eine akustische Oberflächenwelle über die Probe, dann bewegt sich jeder Punkt der Probenoberfläche auf einer Oszillationsbahn um seine Ruhelage $\mathbf{r}_{S,0}$, die durch

$$\mathbf{r}_S(\mathbf{r}_{S,0}, t) = \mathbf{r}_{S,0} + \mathbf{u}(\mathbf{r}_{S,0}, t) \quad (4.44)$$

beschrieben wird. Für eine allgemeine SAW hat der Verschiebungsvektor die Form

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}_{S,0}, t) = \begin{pmatrix} u_1 \cos(\epsilon + \alpha_1) \\ u_2 \cos(\epsilon + \alpha_2) \\ u_3 \cos(\epsilon + \alpha_3) \end{pmatrix}, \quad (4.45)$$

³Eine Theorie zur Interpretation von STM-Topographien, die im Gegensatz hierzu den Tunnelstrom als Integral über alle möglichen Tunnelpfade behandelt und somit auch die geometrische Ausdehnung der Spitze berücksichtigt, wurde von Nakagiri und Kaizuka [79] entwickelt.

wobei $\epsilon \stackrel{\text{def}}{=} \omega_{\text{SAW}} t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{S,0}$ gilt⁴. Es sind u_1 , u_2 und u_3 die Amplituden der oszillatorischen Bewegungen in den drei Raumrichtungen, deren Phasenbeziehung durch α_i , $i = 1, 2, 3$ gegeben sind. Um die geometrische Anschauung zu erleichtern, wird der Tunnelvorgang nun im Ruhesystem der Probenoberfläche betrachtet, in dem die Spitze die Oszillation durchführt. Diese Situation zeigt die Abb. 4.13 (b), in der vereinfachend nur der Schnitt durch die Probenoberfläche in der Sagittalebene gezeichnet ist. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit breite sich die SAW in positiver x-Richtung aus. Es seien $P_{tip,0}$ der Mittelpunkt der Trajektorie der Spitze, deren aktuelle Position P_{tip} um den negativen Verschiebungsvektor $-\mathbf{u}(t)$ um $P_{tip,0}$ verschoben ist. $P_{S,0}$ ist der Punkt der Probenoberfläche, der $P_{tip,0}$ am nächsten ist.

$\mathbf{d}_0 \stackrel{\text{def}}{=} \overrightarrow{P_{S,0}P_{tip,0}}$ ist also die Oberflächennormale und damit der Tunnelpfad bei ruhender Spitze, dessen Länge mit d_0 bezeichnet werde. Analog ist der Punkt P_T der Probenoberfläche der aktuellen Spitzenposition P_{tip} am nächsten. Der Tunnelpfad bei oszillierender Spitze ist demnach $\mathbf{d}_{path} \stackrel{\text{def}}{=} \overrightarrow{P_T P_{tip}}$, wobei sich der Aufpunkt P_T mit der oszillierenden Spitze mitbewegt. Die entscheidende Vereinfachung besteht nun darin, anzunehmen, daß sich der Aufpunkt P_T nicht auf der Probenoberfläche sondern auf der Tangentialebene T durch $P_{S,0}$ bewegt. Der Tunnelpfad \mathbf{d}_{path} ist dann das Lot von der aktuellen Spitzenposition P_{tip} auf die Tangentialebene T. Im SAW-STM-Experiment liegt die Länge des Verschiebungsvektors im Sub-Angstrom-Bereich, so daß sich der Aufpunkt P_T nur in einer Sub-Angstrom-Umgebung um $P_{S,0}$ bewegt. Die sich ergebenden Wegdifferenzen zwischen realer Probenoberfläche und Tangentialebene sind daher klein gegenüber dem Tunnelabstand von typischerweise mehreren Angstrom. Damit ist die Näherung der Probenoberfläche durch die Tangentialebene gerechtfertigt.

Es sei $\mathbf{b} \stackrel{\text{def}}{=} \overrightarrow{P_{tip}P_{S,0}}$ der Verbindungsvektor zwischen der aktuellen Spitzenposition und $P_{S,0}$. Unter der Annahme, daß sich P_T auf der Tangentialebene T bewegt, sind \mathbf{d}_{path} und \mathbf{d}_0 parallel. Daraus folgt, daß der Tunnelabstand die Projektion von \mathbf{b} auf \mathbf{d}_0 ist:

$$d(t) = |\mathbf{d}_{path}(t)| = \frac{\mathbf{b}(t) \cdot \mathbf{d}_0}{|\mathbf{d}_0|} = \frac{(\mathbf{d}_0 - \mathbf{u}(t)) \cdot \mathbf{d}_0}{d_0} = d_0 - \frac{\mathbf{u}(t) \cdot \mathbf{d}_0}{d_0} \quad (4.46)$$

Mit Gleichung 4.45 und $\mathbf{d}_0 = (d_{01}, d_{02}, d_{03})$ läßt sich der Tunnelabstand für eine beliebige über die Probe laufende Oberflächenwelle berechnen:

$$d(t) = d_0 - \frac{1}{d_0} \sum_{i=1}^3 u_i d_{0i} \cos(\epsilon + \alpha_i) \quad (4.47)$$

Da die Summe dreier harmonischer Schwingungen derselben Frequenz wieder eine harmonische Schwingungen dieser Frequenz ist, läßt sich der zeitabhängige Tunnelstrom auch als

$$d(t) = d_0 + d_1 \cos[\epsilon - \varphi] \quad , \quad (4.48)$$

⁴Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird im folgenden $\alpha_1 = 1$ angenommen.

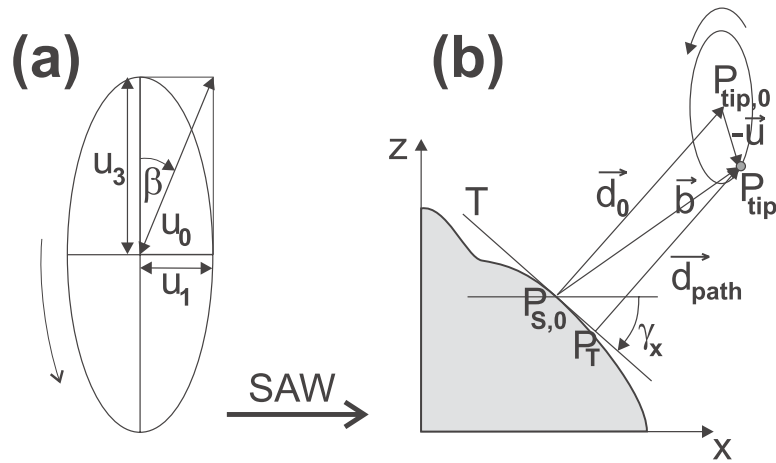


Figure 4.13: Die Geometrie der Oszillationsellipse und des modulierten Tunnelstromes. (a) Die Longitudinalkomponente u_1 ist mit der Transversalkomponente u_3 über den Ellipsenwinkel β und die Ellipsenhypothense u_0 verknüpft. (b) Im Ruhesystem der Probenoberfläche oszilliert die Position der Spitze P_{tip} auf der Oszillationsellipse um die mittlere Position $P_{tip,0}$. Im hier vorgestellten Modell wird angenommen, daß sich der Endpunkt des Tunnelpfades \vec{d}_{path} auf der Tangentialebene T der Probenoberfläche bewegt. γ_x ist der Steigungswinkel der Probenoberfläche in Wellenausbreitungsrichtung.

schreiben. Wie am letzten Term der Gleichung 4.46 abzulesen ist, ist der harmonisch oszillierende Anteil $\cos(\epsilon - \varphi)$ des Tunnelabstandes die Projektion des Verschiebungsvektors \vec{u} auf den Tunnelpfad \vec{d}_0 bei ruhender Spitze. Hieraus ergibt sich eine einfache geometrische Konstruktion von d_1 , die die Anschauung der Amplitudenbilder des SAW-STM-Experimentes sehr erleichtert:

Theorem: Die Amplitude der Abstandsmodulation ist die Hälfte der Projektion der Oszillationsbahn der Spitze auf den Tunnelpfad bei ruhender Spitze.

Dies erklärt den Kontrast in den Amplituden-Bildern des SAW-STM-Experimentes: Die Projektion der Oszillationsbahn der Spitze auf den Tunnelpfad bei ruhender Spitze ist eine Funktion des Winkels des Tunnelpfades bei ruhender Spitze. Sie ist damit bei korrigierter Oberfläche ortsabhängig, so daß auch die Amplitude der Abstandsmodulation und damit auch die Amplitude des SAW-STM-Signals ortsabhängig sind.

Dieses Ergebnis wird nun auf die Rayleighwelle angewendet, bei der, wie im Abschnitt 2.2 erläutert und in Abb. 2.2 gezeichnet, die Oszillationsbahn eines Volumenelementes auf der Oberfläche eine in der Sagittalebene polarisierte Ellipse ist. Aus den Gleichung 2.12 ergeben sich $u_2 = 0$, $\alpha_1 = 0$ sowie $\alpha_3 = -\frac{\pi}{2}$. Hiermit liefert die Gleichung 4.47 für eine sich in positive x -Richtung ausbreitende Rayleighwelle

$$d(t) = d_0 + d_1 \cos[\omega_{SAW}t - kx - \varphi] \quad , \quad (4.49)$$

wobei für die Amplitude d_1 und die Phase φ der Abstandsmodulation gilt:

$$\begin{aligned}
d_1 &= \sqrt{\left(u_1 \frac{d_{01}}{d_0}\right)^2 + \left(u_3 \frac{d_{03}}{d_0}\right)^2} \\
\varphi &= -\arctan\left(\frac{u_1 d_{01}}{u_3 d_{03}}\right) - \frac{\pi}{2}
\end{aligned} \tag{4.50}$$

Um d_1 und φ aus einer numerisch gegebenen Probenoberfläche $z(x, y)$ zu berechnen, werden sie im folgenden als Funktion der partiellen Ableitungen und damit als Funktion der Steigungswinkel γ_x und γ_y von $z(x, y)$ in x- bzw. in y-Richtung dargestellt. Dabei werden verwendet ⁵:

$$\tan \gamma_x = \frac{\partial z}{\partial x} = -\frac{d_{01}}{d_0}, \quad \tan \gamma_y = \frac{\partial z}{\partial y} = -\frac{d_{02}}{d_0}, \quad d_0^2 = d_{01}^2 + d_{02}^2 + d_{03}^2 \tag{4.51}$$

Hiermit und mit der Definitionsgleichung 2.13 des Ellipsenwinkels β folgt:

$$\begin{aligned}
d_1 &= u_0 \sqrt{\frac{\sin^2 \beta}{1 + \frac{(\tan \gamma_y)^2}{(\tan \gamma_x)^2} + \frac{1}{(\tan \gamma_x)^2}} + \frac{\cos^2 \beta}{1 + (\tan \gamma_x)^2 + (\tan \gamma_y)^2}} \\
\varphi &= \arctan(\tan \beta \tan \gamma_x) - \frac{\pi}{2}
\end{aligned} \tag{4.52}$$

(4.53)

Da der Phasennullpunkt durch die Wahl des Zeitnullpunktes gegeben ist, besteht für die Phase der Abstandsmodulation eine Eichfreiheit bezüglich der Addition einer Konstante. Dies wird ausgenutzt, um anhand Gleichung 4.53 eine Phase zu definieren, deren Wertebereich $[-\frac{\pi}{2}, +\frac{\pi}{2}]$ ist:

$$\Phi \stackrel{\text{def}}{=} \varphi + \frac{\pi}{2} = \arctan(\tan \beta \tan \gamma_x) = \arctan\left(\frac{u_1}{u_3} \frac{\partial z}{\partial x}\right) \tag{4.54}$$

Zur Vereinfachung des Sprachgebrauches wird Φ im folgenden schlicht als "Phase" bezeichnet. Eine Interpretation der Phase Φ als Winkel in der Tunnelgeometrie der Rayleighwelle wurde im Rahmen dieser Arbeit gefunden. Sie bedarf einer geometrischen Konstruktion, die gesondert im Anhang vorgestellt wurde. Für das Verständnis der hier folgenden Überlegungen ist die Kenntnis dieser geometrischen Anschauung hilfreich, aber nicht notwendig. Die Gleichungen 4.53 und 4.54 sind Grundlage des im Kapitel 5.3 beschriebenen Unterprogrammes "numerical_amp_phase".

⁵Die Minuszeichen in Gleichung 4.51 berücksichtigen die Tatsache, daß bei negativem Steigungswinkel γ_x oder γ_y die Komponenten d_{01} bzw. d_{02} von d_0 positiv sind.

4.3.2 Die geometrische Anschauung der Phase im Falle einer Rayleighwelle

Das Ziel dieses Abschnittes ist es, eine geometrische Anschauung für die in Gleichung 4.54 definierte Phase beim SAW-STM-Experiment an der Rayleighwelle zu finden und damit das Verständnis der Phasen-Bilder zu erleichtern.

Einführung der Bezeichnungen: Wird wie im Abschnitt 4.3 die Relativbewegung von Spitze und Probenoberfläche im Ruhesystem der Probenoberfläche betrachtet, dann bewegt sich die Spitze in der Sagittalebene auf der Oszillationsellipse, deren Halbachsen mit u_1 und u_3 bezeichnet seien (Abb. 4.14 (a)). Die Rayleighwelle breitet sich in positiver x-Richtung aus. Wie in Abschnitt 4.3 wird die Probenoberfläche durch die Tangentialebene ersetzt. Der Punkt P_t der Oszillationsellipse, der der Tangentialebene am nächsten ist, werde als originärer Proximalpunkt bezeichnet. Entsprechend sei der Punkt der Tangentialebene, der P_t am nächsten ist, mit P_s bezeichnet. Die Verbindungslinie $\overline{P_t P_s}$ steht dann senkrecht auf T_t , der Tangente der Oszillationsellipse in der Sagittalebene durch den Punkt P_t , und auf T_s , der Schnittgeraden der Probenoberfläche und der Sagittalebene. Folglich sind T_t und T_s parallel und haben denselben Steigungswinkel γ_x zur Horizontalen in der Sagittalebene. Wird das gesamte Bild 4.14 (a) in der horizontalen Richtung um den Faktor u_3/u_1 gestreckt, dann ergibt sich die Abb. 4.14 (b), bei der die Spitze auf einer Kreisbahn verläuft. Die sich somit aus T_t ergebende Tangente T'_t hat dann den Steigungswinkel γ'_x . Sie berührt die Kreisbahn im sogenannten äquivalenten Proximalpunkt P'_t . Φ sei die Phase, für die nach Gleichung 4.54 gilt:

$$\tan \Phi = \tan \beta \tan \gamma_x \quad (4.55)$$

Behauptung: Die Phase Φ ist gleich dem Steigungswinkel γ'_x der Tangente T'_t im um den Faktor u_3/u_1 horizontal gestreckten System.

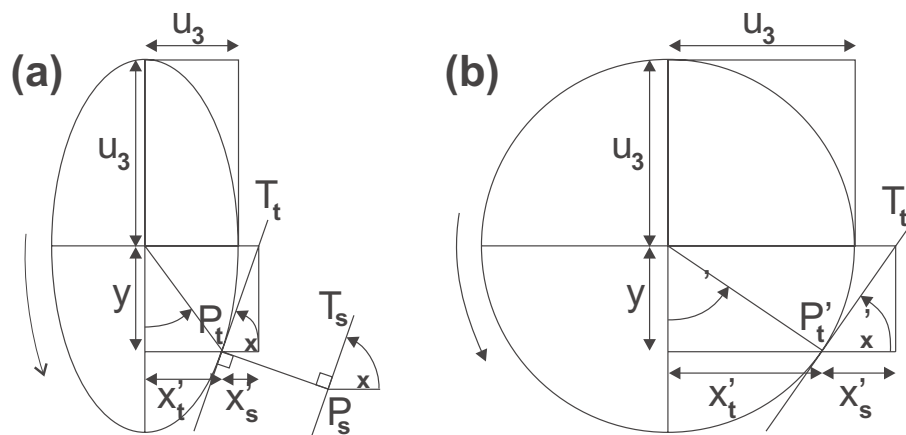


Figure 4.14: Die geometrischen Anschauung der Phase Φ . (a) Im Punkt P_t ist der Tunnelabstand $\overline{P_t P_s}$ minimal. (b) Horizontales Strecken der Zeichnung (a) um den Faktor u_3/u_1 führt die Oszillationsellipse in einen Kreis über. Ω' und γ'_x sind die Phase Φ .

Beweis: Da Φ und γ'_x nur Werte im Bereich $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$ annehmen, genügt es zu zeigen, daß gilt: $\tan \Phi = \tan \gamma'_x$. An den entsprechenden rechtwinkligen Dreiecken in Abb. 4.14 (a) kann man ablesen: $\tan \gamma = y/x_s$.

Da die Länge x'_s aus x_s durch Streckung um den Faktor u_3/u_1 hervorgegangen sind, gilt:

$$\frac{x_s}{x'_s} = \frac{u_1}{u_3} \quad (4.56)$$

Nun wird betrachtet:

$$\tan \Phi = \tan \beta \tan \gamma_x = \frac{u_1}{u_3} \frac{y}{x_s} = \frac{y}{x'_s} = \tan \gamma'_x \quad (4.57)$$

Damit ist die Behauptung bewiesen.

Physikalische Interpretation der Phase Φ : Elementare geometrische Überlegungen in der Abb. 4.14 (b) liefern $\Omega' = \gamma'_x$; also gilt: $\Omega' = \Phi$ ist. Die durch die Rayleighwelle hervorgerufene Bewegung der Spitze auf der Oszillationsellipse entspricht einer Bewegung auf einem Kreis mit konstanter Winkelgeschwindigkeit in dem System, das gegenüber dem Laborsystem um den Faktor u_3/u_1 gestreckt ist. Der Winkel Ω' und damit die Phase Φ ist im gestreckten System demnach der Drehwinkel, bei dessen entsprechendem Drehwinkel Ω im ungestreckten System der Tunnelabstand minimal ist.

4.3.3 Diskussion der Phase als Funktion der Oberflächenneigung und des Ellipsenwinkels

Mit Hilfe der im Abschnitt 4.3.2 entwickelten Anschauung der Phase Φ wird nun die Funktion

$$\Phi(\gamma_x, \beta) = \arctan(\tan \beta \tan \gamma_x) \quad (4.58)$$

diskutiert. In den Abbildungen 4.15 (c) und (d) sind die Funktionen $\Phi(\gamma_x) |_{\beta=const}$ und $\Phi(\beta) |_{\gamma_x=const}$ dargestellt, die wegen der Austauschbarkeit von γ_x und β in Gleichung 4.58 denselben funktionalen Verlauf aufweisen. $\Phi(\gamma_x) |_{\beta=const}$ ist eine ungerade Funktion. Dies entspricht der Anschauung, weil bei einem Wechsel des Vorzeichens von γ_x auch der Steigungswinkel γ'_x , der gleich der Phase Φ ist, sein Vorzeichen ändert. Daher genügt es $\Phi(\gamma_x) |_{\beta=const}$ nur für $\gamma_x \in [0, \frac{\pi}{2}]$ zu betrachten. Mit größer werdendem Steigungswinkel γ_x wandern der originäre und damit auch der äquivalente Proximalpunkt (P_t bzw. P'_t) nach oben, so daß $\gamma'_x = \Phi$ ansteigt. Dies erklärt in anschaulicher Weise, daß die Phase monoton mit dem Steigungswinkel γ_x anwächst. Das monotone Ansteigen der Phase mit dem Ellipsenwinkel β wird aus Abb. 4.14 (a) deutlich: Nimmt bei konstant gehaltenem u_3 und u_1 der Steigungswinkel γ_x zu, dann wandern P_t bzw. P'_t nach oben, $\gamma'_x = \Phi$ vergrößern sich.

Nun werden mehrere Spezialfälle diskutiert, die in der Abb. 4.16 veranschaulicht sind:

(a) $\Phi(\gamma_x) |_{\beta=0^\circ} = 0^\circ$: Die Rayleighwelle ist zu einer reinen Transversalwelle entartet. Unabhängig von der lokalen Topographie wird der minimale Tunnelabstand für die Drehwinkel

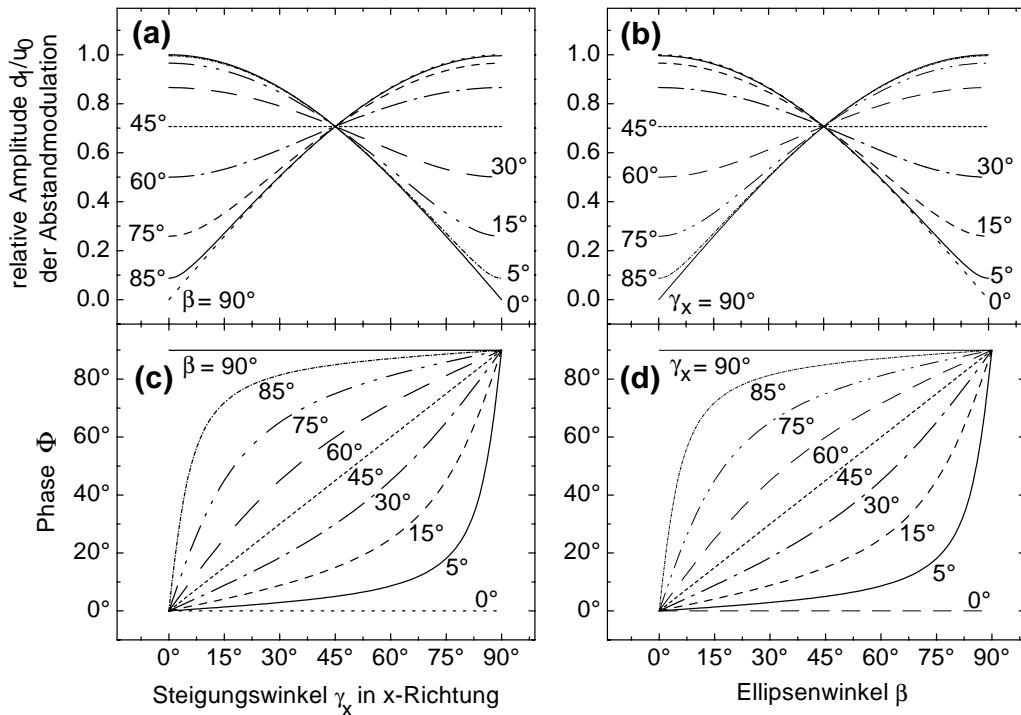


Figure 4.15: Die funktionale Abhängigkeit der Amplitude der Abstandsmodulation und der Phase vom Steigungswinkel γ_x in Ausbreitungsrichtung und dem Ellipsenwinkel. ((a), (b)) betrachten nur Orte, an denen der Steigungswinkel γ_y senkrecht zur Ausbreitungsrichtung gleich Null ist, wohingegen die Phase ((c), (d)) nicht von γ_y abhängt.

$\Omega = \Omega' = \Phi = 0^\circ$ erreicht. Das Phasenbild des SAW-STM-Experimentes zeigt keinen Kontrast.

(b) $\Phi(\gamma_x) |_{\beta=45^\circ} = \gamma_x$: Die Oszillationsellipse ist ein Kreis. Wegen $\gamma_x = \gamma'_x = \Phi$ gibt das Phasenbild den Steigungswinkel der Probenoberfläche in Ausbreitungsrichtung der Rayleighwelle wieder.

(c) $\Phi(\gamma_x) |_{\beta=90^\circ} = 90^\circ$: Der Verschiebungsvektor bewegt sich in der Horizontalen. Es liegt eine rein longitudinale Welle vor. Für beliebige positive γ_x wird der minimale Tunnelabstand beim Winkel $\Omega = \Omega' = 90^\circ$ erreicht, so daß das Phasenbild auf Gebieten mit $\gamma_x > 0^\circ$ keinen Kontrast aufweist. Auf Gebieten mit $\gamma_x < 0^\circ$ beträgt die Phase dagegen konstant -90° .

(d) $\Phi(\beta) |_{\gamma_x=0^\circ} = 0^\circ$: Ist die partielle Ableitung der Probenoberfläche in Wellenausbreitungsrichtung gleich Null, dann liegen der originäre und somit auch der äquivalente Proximalpunkt beim Winkel $\Omega = \Omega' = \Phi = 0^\circ$. Folglich liefern Maxima und Minima in der Topographie im Phasenbild den Wert Null.

(e) $\Phi(\beta) |_{\gamma_x=45^\circ} = \beta$: An Stellen der Probe mit einer Steigung gleich Eins in Wellenausbreitungsrichtung ist der Phasenwert gleich dem Ellipsenwinkel β . Diese Tatsache folgt aus Gle-

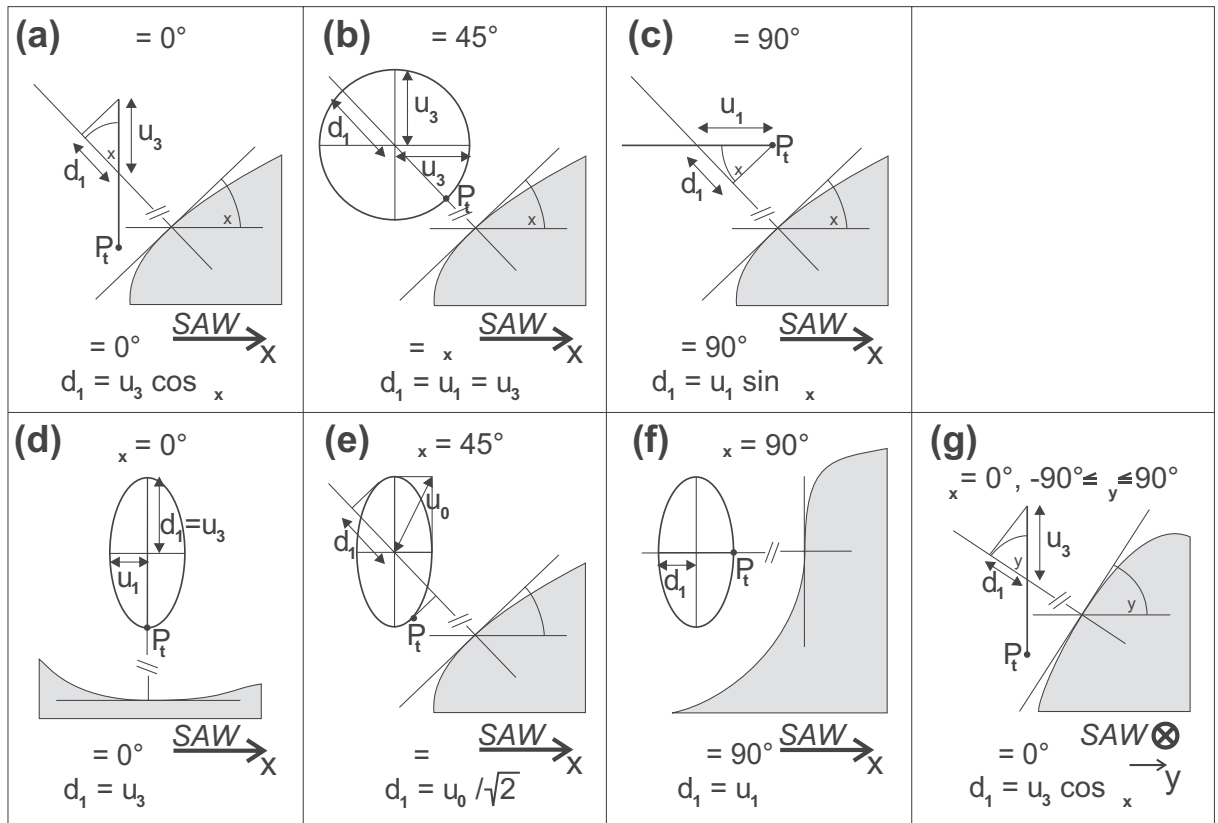


Figure 4.16: Die Amplitude der Abstandsmodulation und Phase für Spezialfälle der Oszillationsellipse ((a)-(b)) der Rayleighwelle und der Oberflächenneigung ((d)-(g)). Die Aussagen über die Amplitude d_1 der Abstandsmodulation in (a)-(f) gelten nur für $\gamma_y = 0^\circ$. In (g) breitet sich die SAW senkrecht zur Zeichenebene aus. d_1 ist nach dem verwendeten Modell die Projektion der Oszillationsellipse auf die Oberflächennormale. Die Phase Φ ergibt sich aus der Lage des originären Proximalpunktes P_t .

ichung 4.58, hat jedoch keine einfache Anschauung.

(f) $\Phi(\beta) |_{\gamma_x=90^\circ} = 90^\circ$: Unabhängig vom Ellipsenwinkel β betragen die Winkel $\Omega = \Omega' = \Phi$, für die der Tunnelabstand minimal ist, 90° . Daß die Elektronen zwischen der Spitze und einem senkrecht stehendem Abschnitt der Probenoberfläche tunneln, ist jedoch im realen SAW-STM-Experiment nahezu ausgeschlossen.

Mit der nach β umgestellten Gleichung 4.58 ist es möglich, aus der im SAW-STM-Experiment gemessenen Phase am Ort eines bekannten Steigungswinkels γ_x den Ellipsenwinkel und damit das Achsenverhältnis der Oszillationsellipse zu berechnen. Der Ellipsenwinkel β typischer Rayleighwellen liegt im Bereich von 30° . In Abb. 4.15 (d) ist abzulesen, daß $\partial\Phi/\partial\beta |_{\gamma_x=\text{const}}$ Werte zwischen 0 ($\gamma_x = 0^\circ$) und Eins ($\gamma_x = 90^\circ$) annimmt. Ein Fehler $\Delta\Phi$ der Phasenmessung führt zu einem Fehler

$$\Delta\beta \approx \frac{\Delta\Phi}{\frac{\partial\Phi}{\partial\beta} |_{\gamma_x=\text{const}}} \quad (4.59)$$

Bei einem Steigungswinkel $\gamma_x = 45^\circ$ führt ein Meßfehler der Phasenmessung von 1° zu einem

Fehler des Ellipsenwinkels β von 1° ; bei kleineren Steigungswinkeln $\gamma_x < 45^\circ$ ist der resultierende Fehler größer. Mit der hier skizzierten Methode zur Bestimmung des Ellipsenwinkels ist der Meßfehler also durch den Fehler der Phasenmessung nach unten hin begrenzt.

4.3.4 Diskussion der Amplitude der Abstandsmodulation als Funktion der Oberflächenneigung und des Ellipsenwinkels für die Rayleighwelle

Wie oben hergeleitet, ist die Amplitude der Abstandsmodulation die Projektion der Oszillationsbahn der Spitze auf den Tunnelpfad bei ruhender Spitze, also auf die Oberflächennormale, die die mittlere Position der Spitze trifft. Dieser Sachverhalt wird durch die Gleichung 4.53 ausgedrückt. Die darin auftretende Funktion $d_1(\beta, \gamma_x, \gamma_y)$ soll in diesem Abschnitt diskutiert werden. Wegen ihrer Komplexität ist dies in vertretbarem Aufwand nur für Spezialfälle des Definitionsbereiches möglich. Im folgenden wird daher die Amplitude d_1 der Abstandsmodulation an den Stellen der Probenoberfläche betrachtet, an denen der Steigungswinkel γ_y senkrecht zur Ausbreitungsrichtung $+x$ gleich Null ist. Dies sind die Orte der korrigierten Oberfläche, an denen der Gradient in der Sagittalebene liegt, also zum Beispiel Grate (analog zu einer "Gratwanderung") oder Rinnen, die in Ausbreitungsrichtung verlaufen. Mit $\gamma_y = 0$ vereinfacht sich die Gleichung 4.53 zu:

$$d_1(\beta, \gamma_x) |_{\gamma_y=0} = u_0 \sqrt{\sin^2 \beta \sin^2 \gamma_x + \cos^2 \beta \cos^2 \gamma_x} \quad (4.60)$$

Die Funktionen $d_1(\beta) |_{\gamma_y=0, \gamma_x=\text{const}}$ und $d_1(\gamma_x) |_{\gamma_y=0, \beta=\text{const}}$ sind in den Abbildungen 4.15 (a) und (b) gezeichnet. Wegen der Austauschbarkeit von β und γ_x in Gleichung 4.60 sind beide Kurvenscharen identisch. Zusätzlich gilt die in den Abbildungen offensichtliche Symmetriebeziehung

$$d_1(\beta, \gamma_x) |_{\gamma_y=0} = d_1(90^\circ - \beta, 90^\circ - \gamma_x) |_{\gamma_y=0} \quad (4.61)$$

Diese wird anschaulich, wenn man beachtet, daß der Übergang von γ_x zu $(90^\circ - \gamma_x)$ und der Übergang von β zu $(90^\circ - \beta)$ eine Spiegelung der Probenoberflächennormale und der Oszillationsellipse an der Winkelhalbierenden $x = y$ bedeutet.

Es wird nun die Amplitude der Abstandsmodulation für spezielle Ellipsenwinkel und Oberflächenneigungen diskutiert. Die geometrischen Anschauungen dieser Spezialfälle ergeben sich aus der Abb. 4.16, die funktionalen Verläufe finden sich in den Plots der Abb. 4.15 wieder:

(a) $d_1(\gamma_x) |_{\gamma_y=0^\circ, \beta=0^\circ} = u_3 \cos \gamma_x$: Es liegt eine reine Transversalwelle vor. Die Amplitude der Abstandsmodulation ist die Projektion der Transversalkomponente u_3 auf die Oberflächennormale.

(b) $d_1(\gamma_x) |_{\gamma_y=0^\circ, \beta=45^\circ} = u_3 = u_1$: Die Oszillationsellipse ist ein Kreis. Unabhängig von γ_x ist d_1 gleich dem Kreisradius $u_1 = u_3$, so daß das Amplitudenbild entlang von Linien mit $\gamma_y = 0^\circ$ keinen Kontrast zeigt.

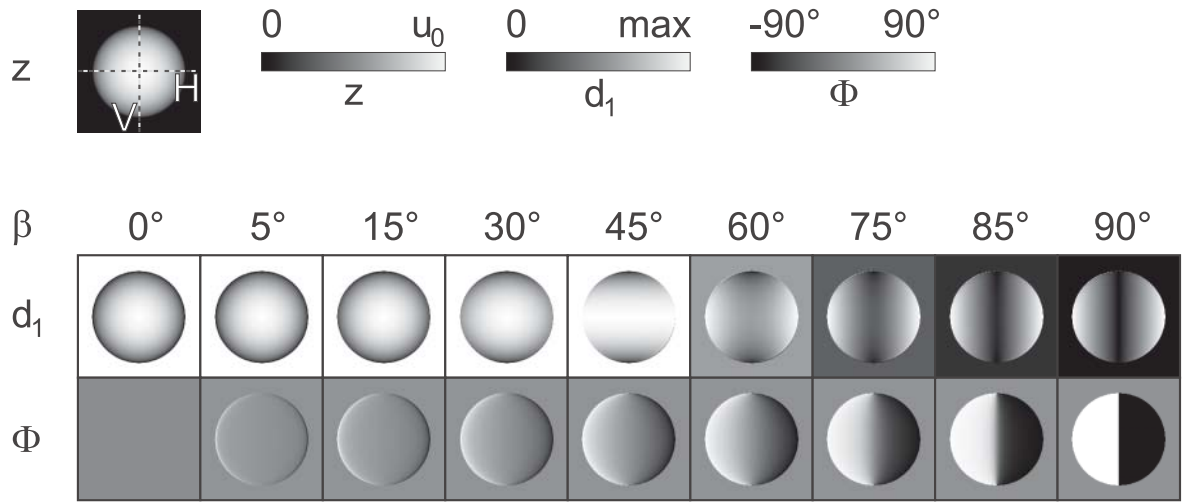


Figure 4.17: Amplitude d_1 der Abstandsmodulation und Phase Φ bei der Topographie einer Halbkugel. Die Simulation wurde für unterschiedlich Werte des Ellipsenwinkels β durchgeführt. Während alle Phasenbilder dieselbe Farbskalierung haben, umfaßt die Grauwertskala eines jeden Amplitudenbildes nur den Wertebereich $[0, d_{1,max}]$ des jeweiligen Amplitudenbildes.

(c) $d_1(\gamma_x) \mid_{\gamma_y=0^\circ, \beta=90^\circ} = u_1 \sin \gamma_x$: Die Rayleighwelle ist zu einer reinen Longitudinalwelle entartet. d_1 ist die Projektion der Longitudinalkomponente u_1 auf die Oberflächennormale.

(d) $d_1(\beta) \mid_{\gamma_x=0^\circ, \gamma_y=0^\circ} = u_3 = u_0 \cos \beta$: Da bei Rayleighwellen in der Regel gilt $u_1 < u_3$, erreicht die Amplitude der Abstandsmodulation an Orten mit horizontaler Tangentialebene ihr Maximum u_3 . Orte im Amplitudenbild, an denen die Amplitude des SAW-STM-Signals maximal ist, entsprechen in der Topographie also lokalen Maxima, lokalen Minima oder Sattelpunkten.

(e) $d_1(\beta) \mid_{\gamma_x=45^\circ, \gamma_y=0^\circ} = u_0/\sqrt{2}$: Beträgt die Steigung in Wellenausbreitungsrichtung Eins und ist die Steigung senkrecht zur Ausbreitungsrichtung gleich Null, dann hängt d_1 nur vom Ellipsenradius u_0 ab. Diese Tatsache ist nicht unmittelbar anschaulich.

(f) $d_1(\beta) \mid_{\gamma_x=90^\circ, \gamma_y=0^\circ} = u_1 = u_0 \sin \beta$: d_1 ist gleich der Longitudinalkomponente u_1 , die in der Regel kleiner als u_3 ist. Das Tunneln in einen senkrecht stehenden Abschnitt der Probenoberfläche ist jedoch unwahrscheinlich.

(g) $d_1(\beta, \gamma_y) \mid_{\gamma_x=0^\circ} = u_3 \cos \gamma_y$: Dieser Fall unterscheidet sich von den anderen Fällen darin, daß der Steigungswinkel γ_y senkrecht zur Ausbreitungsrichtung beliebige Werte zwischen -90° und $+90^\circ$ annehmen kann, die Steigung in Ausbreitungsrichtung aber gleich Null ist ($\gamma_x = 0$). Dann ist die Amplitude d_1 der Abstandsmodulation die Projektion der Transversalkomponente u_3 auf die Oberflächennormale. Für den Fall $\gamma_x = 0$ und $|\gamma_y| = 90^\circ$ erreicht d_1 den Minimalwert Null. An Orten im Amplitudenbild mit verschwindender Amplitude steht die Oberflächennormale also senkrecht auf der Sagittalebene.

Die bisher gewonnenen Erkenntnisse über die Amplitude der Abstandsmodulation und die

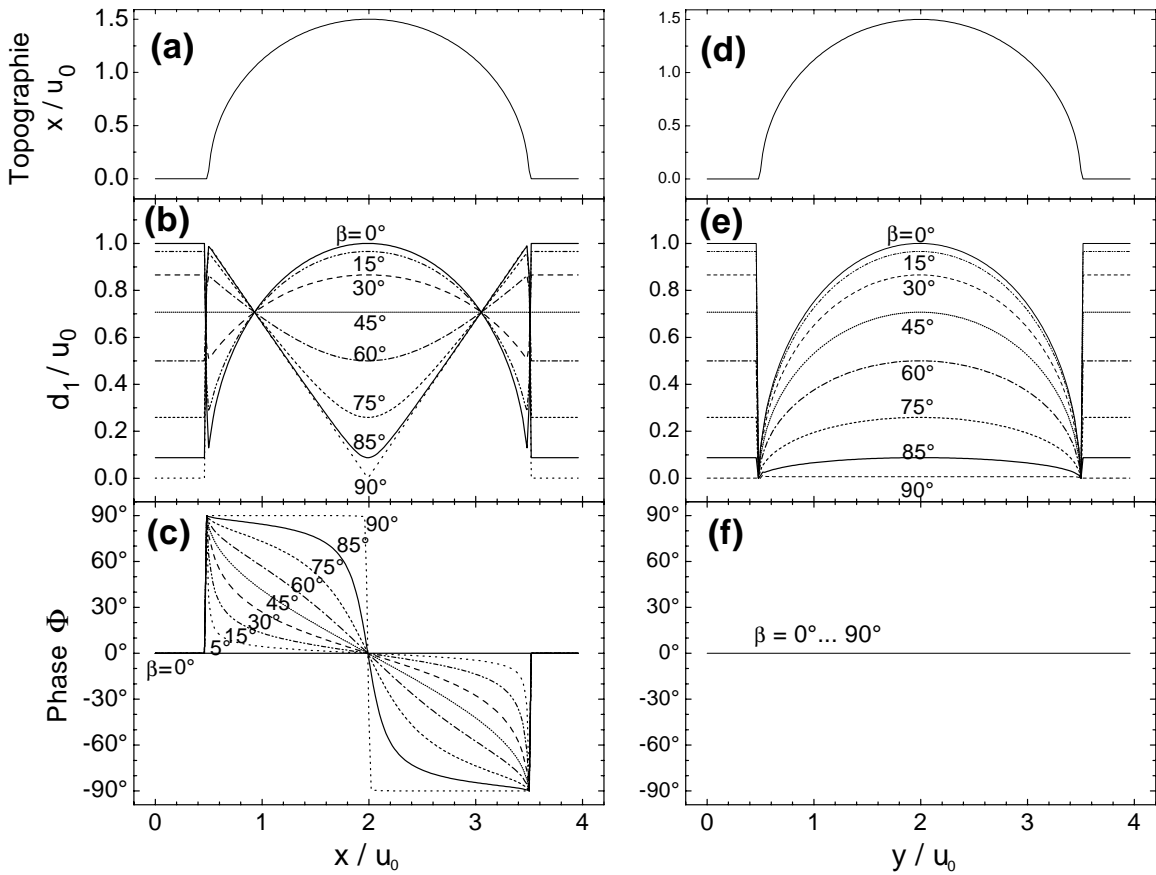


Figure 4.18: Berechnete Amplitude und Phase bei der Topographie einer Halbkugel. Es sind die Schnitte durch die Bilder der Topographie, der Amplitude und der Phase entlang der Linien H ((a), (b), (c)) und V ((d), (e), (f)) für verschiedene Ellipsenwinkel β dargestellt. Die Einheit aller Längen ist die Ellipsenhypothense u_0 .

Phase beim SAW-Experiment an einer Rayleighwelle werden nun auf die Topographie einer Halbkugel $z = \sqrt{R^2 - x^2 - y^2}$ angewendet. Die Halbkugel ist dafür besonders geeignet, weil in ihrem Definitionsbereich die Steigungswinkel γ_x und γ_y alle Kombinationen im Wertebereich $[-90^\circ, +90^\circ]^2$ annehmen. Mit der in Kapitel 5 beschriebenen Software wurden zur numerisch generierten Halbkugel-Topographie für unterschiedliche Ellipsenwinkel die Amplitude der Abstandsmodulation und die Phase berechnet und als Grauwertbilder dargestellt (Abb. 4.17). Die Profile entlang der Schnittlinien H und V (parallel bzw. senkrecht zur Wellenausbreitungsrichtung) zeigt die Abb. 4.18.

Im Falle der zur reinen Transversalwelle entarteten Rayleighwelle ($\beta = 0^\circ$) hängt der Partikelverschiebungsvektor nicht von der Ausbreitungsrichtung ab, so daß das Amplituden- und das Phasenbild die Topographie in isotroper Weise abbildet. Aus Gleichung 4.60 folgt $d_1 = u_0 \sqrt{1 - (x/R)^2}$, d_1 ist also die um den Faktor u_0/R vertikal gestreckte Topographie der Halbkugel. Da für $\beta = 0^\circ$ der originäre Proximalpunkt der unterste Punkt der Oszillationsbahn

der Spitze ist, die die Phase gleich Null. Die Abhängigkeit der Amplituden- und Phasenbilder besteht für alle $\beta > 0^\circ$ und wird umso ausgeprägter, je größer man den Ellipsenwinkel β wählt. Auf der Linie V liegt der oben diskutierte Spezialfall (**g**) $\gamma_x = 0^\circ$ vor, bei dem die Phase konstant gleich Null ist. Ist die Oszillationsellipse zum Kreis entartet ($\beta = 45^\circ$), folgt aus Gleichung 4.60 $d_1 = u_0 \sqrt{1 - (y/R)^2}$, die Amplitude der Abstandsmodulation ist also von der Koordinate x unabhängig (Abb. 4.18(b)). Für ($\beta = 90^\circ$) liegt eine reine Longitudinalwelle vor. In diesem Fall hängt die Phase nur vom Vorzeichen des Steigungswinkels in Ausbreitungsrichtung ab. d_1 ist von y unabhängig und folgt der Gleichung $d_1 = u_0 |x| / R$, was den linearen Verlauf von $d_1(x) |_{\beta=90^\circ}$ in (Abb. 4.18(b)) erklärt. Abschließend bestätigen die Amplitudenbilder, daß sich für aufrechtstehende Oszillationsellipsen $0^\circ \leq \beta \leq 45^\circ$ an Orten mit horizontaler Tangentialebene die maximale Amplitude ergibt.

4.4 Der quantitative Vergleich gemessener und simulierter SAW-STM-Bilder

Auf Basis der in Abschnitt 4.3 vorgestellten Theorie zum SAW-STM-Signal auf der korrigierten Oberfläche errechnet das in Abschnitt 5.3 beschriebene Programm "numerical_amp_phase" aus einem gemessenen Topographiebild ein simuliertes Amplitudenbild und ein simuliertes Phasenbild. Die Eingabeparameter dabei sind die Ellipsenhypothense, der Ellipsenwinkel und die Ausbreitungsrichtung der Rayleigh-Welle. Um beurteilen zu können, wie stark sich diese Eingabeparameter von den in der realen Welle vorliegenden Parametern unterscheiden, muß die Qualität dieser Simulation quantitativ bemessen werden. Zu diesem Zweck werden in diesem Abschnitt der Phasen- und der Amplitudenkorrelationsfehler definiert, die ein Maß für die Abweichung des simulierten vom gemessenen Amplitudenbildes bzw. des simulierten vom gemessenen Phasenbildes sind. Das Problem, daß die absolute Amplitude der Rayleigh-Welle sowie die genaue Phasenlage der Oberflächenoszillation in der Regel unbekannt sind, erschwert den quantitativen Vergleich gemessener und simulierter SAW-STM-Bilder. Durch eine adäquate Definition der sogenannten Amplituden- und Phasenkorrelationsfehler wird dieses Problem gelöst. Damit die Größenordnung der Korrelationsfehler aussagekräftig ist, werden sie so normiert, daß sie beim Vergleich zweier maximal verrauschter Bilder gleich 1 sind.

4.4.1 Die Definition des Phasenkorrelationsfehlers

Es seien Φ_{ij}^{meas} und Φ_{ij}^{sim} die Phasenwerte des Bildpunktes mit den Koordinaten (i,j) des gemessenen und des simulierten Phasenbildes Φ^{meas} bzw. Φ^{sim} . Beide Bilder werden ohne Beschränkung der Allgemeinheit als quadratisch mit einer Kantenlänge von N Bildpunkten angenommen. Die Phasenwerte liegen im Intervall $]-180^\circ, +180^\circ]$. Gesucht ist nun eine Funktion E_Φ , der sogenannte Phasenkorrelationsfehler der beiden Verteilungen Φ^{meas} und Φ^{sim} , die folgende Bedingungen erfüllt:

Bedingung 1: $E_\Phi(\Phi^{meas}, \Phi^{sim})$ ist ein Maß für die Abweichung zwischen dem gemessenen und dem simulierten Phasenbild.⁶

Bedingung 2: Der Phasenkorrelationsfehler ist unabhängig von der im Experiment unbekannten über alle Bildpunkte konstanten Differenz zwischen der gemessenen Phase und der tatsächlichen Phase der Abstandsmodulation.

Bedingung 3: Der Phasenkorrelationsfehler ist normiert, d.h. E_Φ zweier Phasenbilder, deren Phasenwerte willkürlich zwischen -180° und $+180^\circ$ verteilt sind, beträgt 1.

Bedingung 4: Die Definition von E_Φ berücksichtigt, daß der Betrag der Differenz zweier Phasenwerte nur im Intervall $[0, 180^\circ]$ liegen kann.

Es sei nun Φ_{ij}^{diff} als die Differenz aus gemessenem und simuliertem Phasenbild definiert, so

⁶Mit dem Begriff Abweichung ist hier keine mathematisch definierte Größe gemeint, sondern der vom erfahrenen Experimentator intuitiv empfundene Unterschied zwischen den Bildern.

daß gilt:

$$\Phi_{ij}^{meas} = \Phi_{ij}^{sim} + \Phi_{ij}^{diff} \quad (4.62)$$

Die Verteilung Φ_{ij}^{diff} kann eindeutig als Summe aus ihrem Mittelwert $\Delta\Phi = \overline{\Phi^{diff}}$ und aus der Verteilung Φ_{ij}^{err} dargestellt werden, deren Mittelwert gleich Null ist ($\overline{\Phi^{err}} = 0$):

$$\Phi_{ij}^{diff} = \Delta\Phi + \Phi_{ij}^{err} \quad (4.63)$$

Aus 4.62 folgt hieraus

$$\Phi_{ij}^{meas} = \Phi_{ij}^{sim} + \Delta\Phi + \Phi_{ij}^{err} . \quad (4.64)$$

Hierbei spiegelt der konstante Differenzterm $\Delta\Phi$ die unbekannte Differenz zwischen gemessener Phase und tatsächlicher Phase der Abstandsmodulation wieder. Die Bedingung 2 wird also erfüllt, indem zur Bemessung der Abweichung zwischen Φ^{meas} und Φ^{sim} nur Φ^{err} ausgewertet wird. Ein Maß für diese Abweichung (Bedingung 1) ist dabei die Standardabweichung der Verteilung Φ_{ij}^{err} :

$$s(\Phi^{err}) \stackrel{def}{=} \sqrt{\frac{1}{N^2 - 1} \sum_{i,j} \left(\Phi_{ij}^{err} - \overline{\Phi^{err}} \right)^2} \quad (4.65)$$

Der Phasenkorrelationsfehler E_Φ wird nun als Produkt aus $s(\Phi_{ij}^{err})$ und einem noch zu bestimmendem Normierungsfaktor definiert:

$$E_\Phi \stackrel{def}{=} E_0 s(\Phi^{err}) . \quad (4.66)$$

Hieraus folgt mit 4.64

$$E_\Phi = E_0 s(\Phi^{meas} - \Phi^{sim} - \Delta\Phi) = E_0 s(\Phi^{meas} - \Phi^{sim}), \quad (4.67)$$

wobei ausgenutzt wurde, daß die Verschiebung der Verteilung $\Phi^{meas} - \Phi^{sim}$ um die Konstante $\Delta\Phi$ keinen Einfluß auf die Standardverteilung hat. Die in Gleichung 4.67 auszuwertenden Differenzen $\Phi_{ij}^{meas} - \Phi_{ij}^{sim}$ können Werte im Intervall $[-360^\circ, +360^\circ]$, der durch eine Modulo 360° -Operation auf den Bereich $[-180^\circ, +180^\circ]$ eingeschränkt werden kann. Da hier nur die Beträge der Phasendifferenzen interessieren, ist es notwendig, jede Phasendifferenz $\Delta\varphi \in]180^\circ, 360^\circ[$ durch den Wert $360^\circ - \Delta\varphi$ zu ersetzen und somit in das Intervall $[0^\circ, 180^\circ]$ zu transformieren⁷. Diese Modul 360° -Operation und die Transformation in das Intervall $[0^\circ, 180^\circ]$ wird in der beschriebenen Art und Weise von der Funktion $D: [-360^\circ, +360^\circ] \rightarrow [0^\circ, 180^\circ] - 360^\circ, 360^\circ]$

⁷So ist eine Phasendifferenz von 200° betragsmäßig mit der Phasendifferenz 160° gleich.

durchgeführt. Es gelten zum Beispiel $D(370^\circ)=10^\circ$ und $D(230^\circ)=130^\circ$. Um die Bedingung 4 zu erfüllen, wird die Funktion D in die Gleichung 4.67 eingeführt:

$$E_\Phi = E_0 \, s \left(D(\Phi^{meas} - \Phi^{sim}) \right) \quad (4.68)$$

Nun wird der Normierungsfaktor E_0 so bestimmt, daß die Bedingung 3 erfüllt ist. Sind $\Phi^{ran,1}$ und $\Phi^{ran,2}$ zwei Phasenbilder, deren Werte willkürlich im Intervall $[-180^\circ, +180^\circ]$ verteilt sind, dann sind die Phasenwerte der Verteilung $D(\Phi^{ran,1} - \Phi^{ran,2})$ willkürlich im Intervall $[0^\circ, 180^\circ]$ verteilt. Folglich gilt für den Mittelwert dieser Verteilung:

$$\overline{D(\Phi^{ran,1} - \Phi^{ran,2})} = 90^\circ \quad (4.69)$$

Das Quadrat der Standardabweichung berechnet sich zu:

$$s^2 \left(D(\Phi^{ran,1} - \Phi^{ran,2}) \right) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \left(180^\circ \frac{i}{n} - 90^\circ \right)^2 = \frac{180^{\circ 2}}{12} \quad (4.70)$$

Damit der Phasenkorrelationsfehler zweier Phasenbilder, deren Werte willkürlich im Intervall $[-180^\circ, +180^\circ]$ verteilt sind, gleich 1 ist, muß der Normierungsfaktor E_0 gleich $\sqrt{12}/180^\circ$ betragen. Damit lautet die Definition des Phasenkorrelationsfehler des gemessenen und des simulierten Phasenbildes Φ^{meas} und Φ^{sim} :

$$E_\Phi \stackrel{def}{=} \frac{\sqrt{12}}{180^\circ} \, s \left(D(\Phi^{meas} - \Phi^{sim}) \right) \quad (4.71)$$

4.4.2 Die Definition des Amplitudenkorrelationsfehlers

In Analogie zum vorhergehenden Abschnitt 4.4.1 wird nun der Amplitudenkorrelationsfehler E_{Amp} definiert, mit dem die Abweichung zwischen einem gemessenen und einem simulierten Amplitudenbild A^{meas} bzw. A^{sim} quantitativ beschrieben werden kann. Wiederum bestehen ohne Beschränkung der Allgemeinheit beide Amplitudenbilder aus N^2 Bildpunkten, deren Amplitudenwerte A_{ij}^{meas} bzw. A_{ij}^{sim} seien. Der Amplitudenkorrelationsfehler soll so definiert sein, daß folgende Bedingungen erfüllt sind:

Bedingung 1: $E_{Amp}(\Phi^{meas}, \Phi^{sim})$ ist ein Maß für die Abweichung zwischen dem gemessenen und dem simulierten Amplitudenbild.

Bedingung 2: In der Regel ist der Kalibrierungsfaktor, der die Amplitude des in mV gemessenen SAW-STM-Signals mit der simulierten Amplitude der Abstandsmodulation verknüpft, nicht bekannt. Der Amplitudenkorrelationsfehler soll unabhängig von diesem Kalibrierungsfaktor sein, also nur die Fehler berücksichtigen, die nicht von der Unkenntnis dieses Kalibrierungsfaktors herrühren. Solche Fehler sind zum Beispiel

- Meßfehler oder Artefakte im gemessenen Amplitudenbild,

- Meßfehler des gemessenen Topographiebildes, das der Amplitudensimulation zugrunde liegt,
- Fehler in anderen Eingabeparametern der Simulation,
- die unvollständige Beschreibung des SAW-STM-Experiments durch die Theorie, auf der die Simulation basiert.

Bedingung 3: Der Amplitudenkorrelationsfehler zweier Amplitudenbilder $A^{random,1}$ und $A^{random,2}$, deren Werte im Intervall $]0, A_{max,1}]$ bzw. $]0, A_{max,2}]$ willkürlich verteilt sind, beträgt 1.

Die Abweichung zwischen gemessenem und simuliertem Amplitudenbild werde durch den Abweichungsfaktor b_{ij} beschrieben, der durch

$$A_{ij}^{meas} = b_{ij} A_{ij}^{sim} \quad (4.72)$$

definiert ist. Es wird nun der natürliche Logarithmus $\ln(b_{ij})$ des Abweichungsfaktors betrachtet, wobei

$$\overline{\ln b} = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j} \ln b_{i,j} \quad (4.73)$$

der Mittelwert der Verteilung $\ln b$ ist. Der Fehlerfaktor sei durch $b_{ij}^{err} \stackrel{def}{=} \exp(\ln b_{ij} - \overline{\ln b})$ definiert. Hiermit läßt sich der natürliche Logarithmus des Abweichungsfaktors als Summe aus seinem Mittelwert und einem Rest darstellen:

$$\ln(b_{ij}) = \overline{\ln b} + \ln b_{ij}^{err} \quad (4.74)$$

Folglich hat der Restterm $\ln b_{ij}^{err}$ einen verschwindenden Mittelwert. Aus Gleichung 4.73 folgt, daß $\exp(\overline{\ln b})$ das geometrische Mittel der Verteilung b ist:

$$M^{geom}(b) \stackrel{def}{=} \exp(\overline{\ln b}) = \left(\prod_{i,j} b_{ij} \right)^{\frac{1}{N^2}} \quad (4.75)$$

Analog läßt sich zeigen, daß das geometrische Mittel des Fehlerfaktors gleich Null ist. Gemäß Gleichung 4.74 läßt sich der Abweichungsfaktor b_{ij} also als Produkt seines geometrischen Mittels und dem Fehlerfaktor schreiben:

$$b_{ij} = M^{geom}(b) b_{ij}^{err} \quad (4.76)$$

Da $M^{geom}(b)$ der gemittelte Abweichungsfaktor ist und somit nicht von den Koordinaten des Bildpunktes (i, j) abhängt, liegt es nahe, $M^{geom}(b)$ als den in Experiment unbekannten Kalibrierungsfaktor zwischen der gemessenen und der simulierten Amplitude A^{meas} bzw. A^{sim}

zu interpretieren. Analog wird im folgenden vereinfachend angenommen, daß sich die in der Bedingung 2 aufgezählten von der Unkenntnis des Kalibrierungsfaktors unabhängigen Fehler nur im Fehlerfaktor b_{ij}^{err} ausdrücken. Damit die Bedingung 2 erfüllt ist, wird der Amplitudenkorrelationsfehler als Funktion nur des Fehlerfaktors b_{ij}^{err} definiert:

$$E^{amp} \stackrel{def}{=} E_0^{amp} \frac{\text{med} |b^{err} - \text{med}(b^{err})|}{\text{med}(b^{err})} \quad (4.77)$$

Hierbei ist E_0^{amp} der noch zu bestimmende Normierungsfaktor, und $\text{med}(x)$ bezeichnet den Median, also das 50%-Perzentil, der Verteilung x_i . Gemäß der Gleichung 4.77 gibt der Amplitudenkorrelationsfehler an, wie stark der Fehlerfaktor von seinem Mittelwert abweicht. Diese Abweichung ist ein Maß für die Abweichung zwischen dem gemessenen und dem simulierten Amplitudenbild, womit die Bedingung 1 erfüllt ist.

Mit den Gleichungen 4.72 und 4.76 folgt aus der Gleichung 4.77:

$$E^{amp} = E_0^{amp} \text{med} \left| \frac{\frac{A^{meas}}{A^{sim}}}{\text{med} \left(\frac{A^{meas}}{A^{sim}} \right)} - 1 \right| \quad (4.78)$$

In der Definition des Amplitudenkorrelationsfehlers Gleichung 4.77 wurden anstatt des Mittelwertes der Median verwendet, weil der Median Ausreißer einer Verteilung im Gegensatz zum Mittelwert ignoriert. Ausreißer können sich bei der Division durch simulierte Amplitudenwerte A_{ij}^{sim} ergeben, die nahe bei Null liegen. Auch die Division durch den Median der Fehlerfaktoren in Gleichung 4.77 hat zum Ziel, daß in der Gleichung 4.78 nur der Median und weder arithmetische noch geometrische Mittel auftreten.

Um den Normierungsfaktor E_0^{amp} so zu wählen, daß der Amplitudenkorrelationsfehler die Bedingung 3 erfüllt, muß der Ausdruck E^{amp} für zwei Amplitudenbilder $A^{random,1}$ und $A^{random,2}$ berechnet werden, deren Werte willkürlich im Intervall $[0, A_{max,1}]$ bzw. $[0, A_{max,2}]$ verteilt sind. Da hierbei Mediane analytisch berechnet werden müssen, ist dies schwieriger als die Normierung des Phasenkorrelationsfehlers, bei dem lediglich arithmetische Mittelwerte und Standardabweichungen berechnet werden mußten. In einer Rechnung, die wegen ihrer Länge nicht in diese Dissertationsschrift aufgenommen wurde, ist die analytische Berechnung von E^{amp} für A^1 und A^2 gelungen. Das Ergebnis lautet:

$$\text{med} \left| \frac{\frac{A^{random,1}}{A^{random,2}}}{\text{med} \left(\frac{A^{random,1}}{A^{random,2}} \right)} - 1 \right| = \frac{\sqrt{5} - 1}{2} \quad (4.79)$$

Damit ist der Normierungsfaktor E_0^{amp} bestimmt:

$$E_0^{amp} = \frac{2}{\sqrt{5} - 1} \quad (4.80)$$

5 Software

Prinzipiell ist die "Rastertunnelmikroskopie" auch ohne den Einsatz von Computern durchführbar. So wurden die Scanbewegung und der Tunnelabstand bei den ersten STM-Experimenten Anfang der 80er Jahre von analogen Steuergeräten geregelt und die Oberflächenkorruption von einem xy-Schreiber als Kaskade von Höhenprofilen in Scanrichtung dargestellt. Seit Mitte der 80er Jahre jedoch kommen Computer bei der Steuerung des Experiments sowie bei der Erfassung und Bearbeitung der Meßdaten zum Einsatz. Kernstück aller STM-Programme kommerzieller Anbieter oder Shareware-Programmierer ist dabei die Darstellung der Topographie, des Tunnelstromes oder anderer während des Scans erfaßten Meßgrößen als Falschfarbenbilder, Konturlinienplots oder 3D-Darstellungen. Für die quantitative Auswertung der Daten dienen Schnitte, also Plots der Meßgrößen entlang von Linien im Scanbereich. Eine häufig bei der Bearbeitung von STM-Bildern verwendete Funktion ist das Herausfiltern gewünschter bzw. die Unterdrückung unerwünschter Wellenzahlanteile in der Fouriertransformierten des Bildes. So werden kurzwellige Fourierkomponenten verworfen, um Bilder mit kurzwelligem Rauschen zu glätten. Zur Hervorhebung periodischer Bildmerkmale, etwa einer atomaren Oberflächenstruktur, werden nur die Fourierkomponenten beibehalten, die der zu untersuchenden Periodizität entsprechen.

Das SAW-STM-Experiment stellt Anforderungen, die weder von moderner kommerzieller STM-Software noch von dem zur Experimentsteuerung verwendeten Programm STMPRG der Firma Omicron erfüllt werden. Um die Falschfarbenbilder der Topographie, der Amplitude und der Phase untereinander, mit anderen SAW-STM-Bildern und mit simulierten Bildern effizient und bequem vergleichen zu können, wurde deshalb im Rahmen dieser Arbeit ein umfangreiches Softwarepaket zur Datenauswertung entwickelt. Es besteht aus dem Hauptprogramm "SAW-Viewer", das die oben genannte für STM-Software typische SAW-STM Funktionalität umfaßt, zusätzlich aber um zahlreiche SAW-STM-spezifische Funktionen erweitert wurde. Als Beispiele hierfür seien die Simulation von Amplituden- und Phasenbildern aus gemessenen Topographien und deren quantitativer Vergleich mit gemessenen Amplituden- und Phasenbildern genannt.

5.1 Das Konzept der graphischen Programmierung unter LabVIEW

LabVIEW 6.0 der Firma National Instruments gilt als Standard-Softwareumgebung für Meß- und Prüfapplikationen im wissenschaftlichen und industriellen Bereich. Ausschlaggebend für die Entscheidung, die Software zur Auswertung der STM-SAW-Daten in LabVIEW zu implementieren, war die große Auswahl an mitgelieferten Funktionen und Anzeigeelementen, mit denen mit geringem Programmieraufwand Daten numerisch bearbeitet und dargestellt werden können. Bei einer typischen mit LabVIEW realisierten Meßapplikation werden die vom PC aus über einen Bus angesteuerten Meßinstrumente zu einem "virtuellen Instrument" zusammengefaßt, dessen Frontplatte, bestehend aus Reglern, Knöpfen und Anzeigen, der

Computerbildschirm ist. LabVIEW-Programme heißen daher "virtuelle Instrumente" ("vi") und können analog zu den realen Labor-Instrumenten zu weiteren komplexen virtuellen Instrumenten zusammengeschaltet werden. In Analogie zu einem realen Meßinstrument ist der Quellcode nicht wie bei zeichenorientierten Programmiersprachen ASCII-Text, sondern ein Diagramm, das einer elektrischen Schaltung nachempfunden ist. In diesem "fließen" die Daten in Kabeln, die in Eingabeknoten beginnen, Ein- und Ausgänge der Funktionsknoten und der Unterprogramme ("sub-vi's") durchlaufen und in Ausgabeknoten münden. Den Ein- und Ausgabeknoten entsprechen die Ein- und Ausgabeelemente der Benutzeroberfläche, der "Frontplatte" des virtuellen Instrumentes. Die Codierung in Form eines Diagramms läßt den Datenfluß im Programm direkt erkennen und ermöglicht eine zügige Programmierung ohne eigentlichen Programmtext.

Dieses Konzept der graphischen Programmierung wird im folgenden an dem Programm "partial_derivative_alpha" (Abb. 5.1) erläutert, das die partielle Ableitung $\frac{\partial z}{\partial x} \sin \alpha + \frac{\partial z}{\partial y} \cos \alpha$ eines Topographie-Bildes in Richtung α (Winkel zur x-Achse) berechnet. Den Eingabeelementen auf der Frontplatte für das 2D-Array der topographischen Höhenwerte ("Topography"), für die Bildabmessungen und -auflösung ("Picture Dimensions", im folgenden als Scanparameter bezeichnet) und für den Richtungswinkel in Grad ("alpha (deg)") entsprechen die gleichnamigen Eingabeknoten im Diagramm. Die Unterprogramme "part_der_i_x" und "part_der_i_y" haben das 2D-Array der Höhenwerte und die Bildabmessungen als Eingänge an der linken Seite der Symbole und geben am Ausgang die partiellen Ableitungen in x- bzw. y-Richtung aus. "Sine" und "Cosine" sind von LabVIEW bereitgestellte Funktionen. Numerische Operationen werden an den Symbolen für Addition, Multiplikation und Division durchgeführt. Das so in Richtung des Winkels α abgeleitete 2D-Array wird zum Ausgabeknoten "Partial Derivative of Topography in Direction alpha" geleitet und in der Frontplatte als Grauwertbild dargestellt. Bindet man "partial_derivative_alpha" als Unterprogramm in ein anderes Programm ein, erscheint es dort wie im Fenster "Context Help" der Abb. 5.1 dargestellt im Diagramm als Symbol, an dessen Ein- und Ausgänge Kabel gelegt werden können.

5.2 Das Hauptprogramm "SAW-Viewer"

Das Programm SAW-Viewer liest die Meßdaten im Format der Meßsoftware STMPRG ein, stellt sie dar und startet Unterprogramme zur Datenbearbeitung und Auswertung. Auch der bei der Messung erzeugte Parameterfile wird gelesen. Er enthält als Meßparameter die Bildgröße und -auflösung, die Scangeschwindigkeit, die Scanrichtung, Tunnelspannung und -strom, das Datum und die Uhrzeit der Messung.

Für die Daten des SAW-STM-Experiments stehen vier Datenkanäle zur Verfügung, wobei ein Datenkanal ein Topographie-, ein Amplituden und ein Phasenbild umfaßt. Eine Messung, bestehend aus Vorwärts- und Rückwärtsscan, belegt also zwei Datenkanäle. In die verbleibenden beiden Datenkanäle können bearbeitete Bilder oder Simulationen dieser Messung geladen

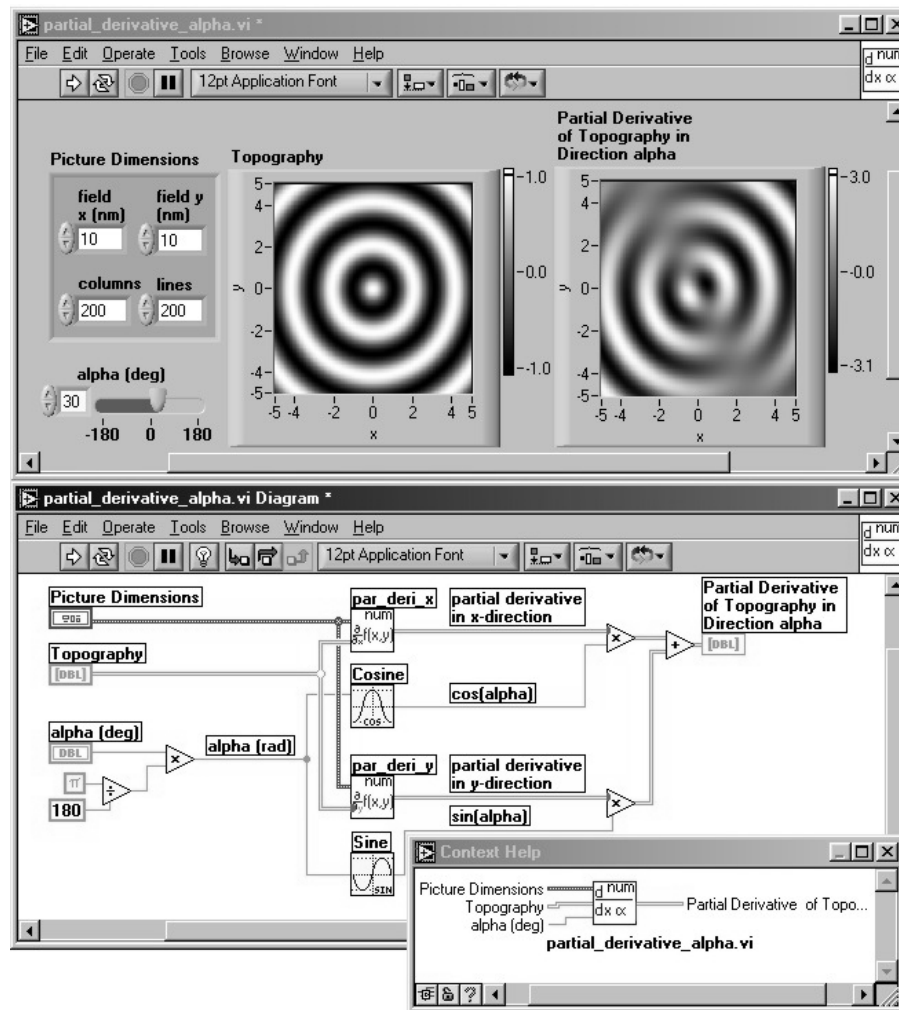


Figure 5.1: Frontplatte, Diagramm und Festlegung der Ein- und Ausgänge des Programmes "partial_derivative_alpha". Die partielle Ableitung eines Topographie-Bildes in Richtung des Winkels α wird berechnet und als Falschfarbenbild dargestellt. Der Programm-Code ist bei der graphischen Programmierung ein Diagramm, in dem die Ein- und Ausgabeelemente der Frontplatte über Kabel mit Funktionsknoten und Unterprogrammen verbunden sind.

werden, oder man verwendet sie für die Betrachtung der Rohdaten, der bearbeiteten Daten oder der Simulationen einer zweiten Messung. Die jeweils drei Bilder zweier beliebiger Datenkanäle können auf einem 17-Zoll-Bildschirm gleichzeitig betrachtet werden (Abb. 5.2). Dies erlaubt es beispielsweise, den Einfluß der Scanrichtung, der Glättung oder der Variation der Meßparameter, etwa der Wellenamplitude, zu untersuchen. Ferner ist es möglich, simulierte mit gemessenen Bildern zu vergleichen. Um die in den sechs Bildern vorkommenden Bildmerkmale, zum Beispiel ein Amplituden-Maximum, das einem Topographie-Maximum entspricht, einander zuordnen zu können, befindet sich in jedem Bild ein Cursor. Diese sechs Cursor bewegen sich bei Verschiebung mit der Maus synchron und markieren somit in allen Bildern dieselbe Position. Zur Unterdrückung von Ausreißern und zur Steigerung des Bildkontrastes können die Falschfarbenskalen für die Topographie, die Amplitude und die Phase durch Eingabe des

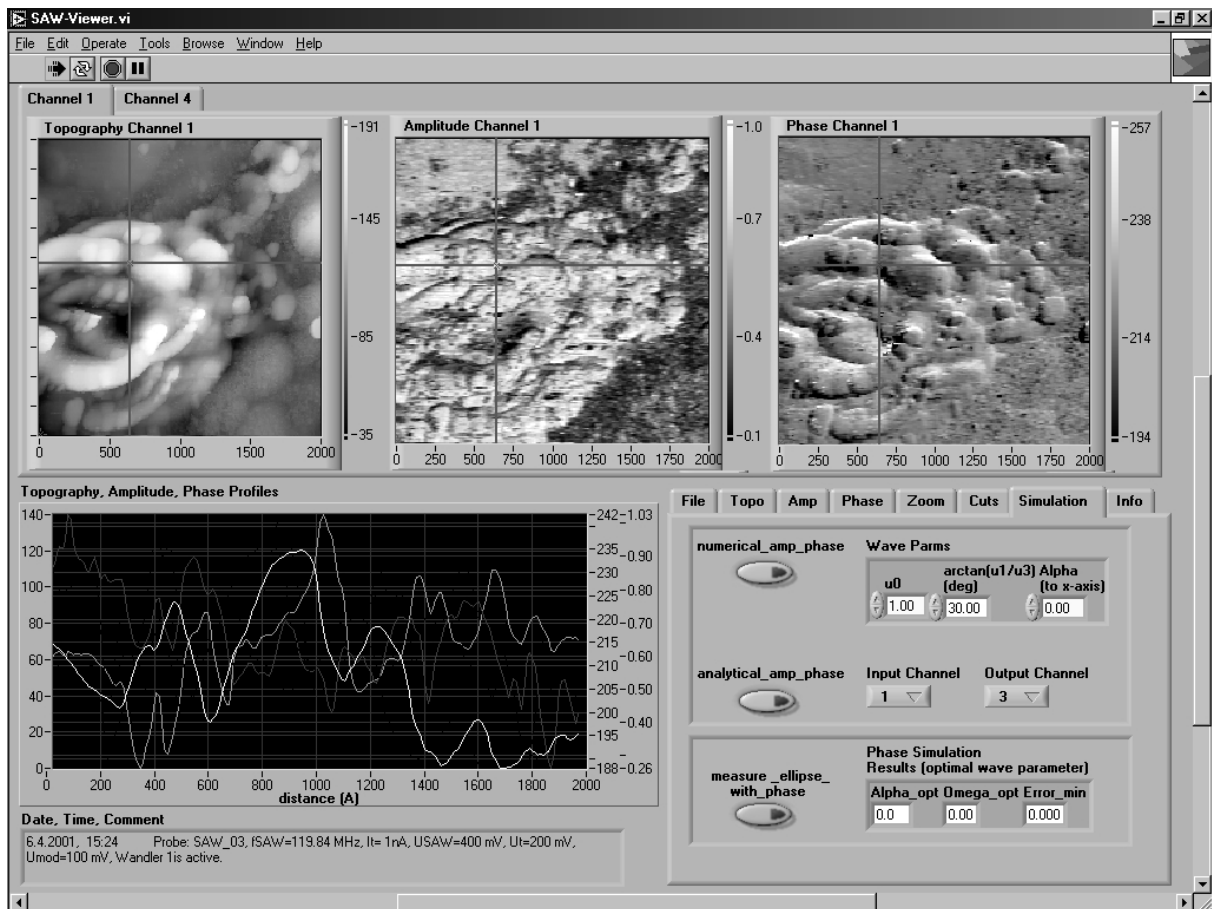


Figure 5.2: Graphische Benutzeroberfläche des Programms "SAW-Viewer". Dieses Hauptprogramm dient der Betrachtung und Weiterverarbeitung gemessener und simulierter SAW-STM-Bilder. Die Daten können in vier Datenkanäle (Channel 1 bis 4) geladen und als Falschfarbenbilder und Schnittprofile entlang beliebiger Linien dargestellt werden. Durch Hochscrollen gelangt der Benutzer zur den Falschfarbenbildern der Kanäle 2 und 3, die im abgebildeten Screenshot nicht enthalten sind. Die Startbuttons für die Unterprogramme, die Eingabeelemente für die Datenbearbeitung und die Anzeigen für die Meßparameter sind auf den Registerkarten "File", "Topo", "Amp", "Phase", "Zoom", "Cuts", "Simulation" und "Info" platziert.

jeweils darzustellenden Werteintervalls angepaßt werden. Die Zoomfunktion ermöglicht es, ein ausgewähltes Bild vergrößert in einem Pop-Up-Fenster darzustellen.

Zusätzlich zu den Falschfarbenbildern besteht die Möglichkeit, die Bilddaten der Topographie, Amplitude und Phase zweier Datenkanäle in einem gemeinsamen Plot in Form von Schnitten darzustellen. Die Schnittlinie kann eine Zeile, eine Spalte oder eine beliebige diagonale Linie sein und wird durch einen bzw. zwei Cursor im Topographie-Bild definiert. Da im Falle einer diagonalen Schnittlinie die Skalenpunkte der x-Achse dieses Plots nicht mit den Bildpunkten zusammenfallen, werden die y-Werte des Plots durch Interpolation der y-Werte der Bildpunkte berechnet. Sollte ein einzelnes Schnittprofil zu verrauscht sein, kann der Benutzer den Mittelwert mehrerer benachbarter paralleler Schnittprofile darstellen lassen.

Allgemein übliche, aber auch SAW-STM-spezifische Funktionen der Bildbearbeitung sind im

Programm SAW-Viewer implementiert:

- Zur Korrektur der Verkipfung der Probenebene gegenüber der Scanebene kann vom Topographiebild eine schiefe Ebene abgezogen werden. Sie ist die mittlere Untergrunde-ebene des Oberflächenprofils, kann aber auch durch drei mit Cursors markierte Punkte definiert werden. Zusätzlich hat der Benutzer die Möglichkeit, durch Bewegen eines Cursors in einem Achsensystem die gewünschte Verkipfung einzugeben, wobei die Kippungswinkel in x- und y-Richtung aus den x- und y-Koordinaten des Cursors berechnet werden.
- Das Unterprogramm "eliminate_all_mavericks" identifiziert in den Bildern einzelne Ausreißer oder Ausreißerlinien und ersetzt diese Bildpunkte durch den Median der acht benachbarten Bildpunkte. Indem der Median und nicht der Mittelwert verwendet wird, werden auch Ausreißer unter diesen acht benachbarten Bildpunkten verworfen. Ausreißerlinien in der Topographie entstehen, z. B. wenn die Tunnelspitze kurzzeitig Cluster mitschleift.
- Kurzwelliges Rauschen in den Bildern der Topographie, der Amplitude und der Phase kann durch Faltung mit einem Gaußprofil einer definierbaren Breite unterdrückt werden. Diese Glättung ist für die bei der Simulation durchgeführten Differenzierung der Bilder notwendig.
- Nicht nur die die Auflösung bestimmenden Mechanismen des Tunnelns, sondern auch die endliche Trägheit der Abstandsregelung, beeinflussen die Abbildung der Probenoberfläche. So unterscheidet sich die gemessene Topographie von der idealen Topographie, die man sich mit einer unendlich schnellen Abstandsregelung aufgezeichnet denken möge. Abhängig von der zweiten Ableitung in der schnellen Scanrichtung wird das Profil geglättet und erfährt relativ zum idealen Profil eine Verschiebung, deren Vorzeichen sich in Vorwärts- und Rückwärtsscans unterscheiden. In ähnlicher Weise erfahren wegen der endlichen Integrationszeit des Lock-In-Verstärkers die Amplituden- und Phasenbilder eine Glättung und eine von der Scanrichtung abhängige Verschiebung. Da sich die Zeitkonstanten der Abstandsregelung und des Lock-In-Verstärkers unterscheiden, sind sich entsprechende Merkmale im Topographie-Bild und folglich in den simulierten Amplituden- und Phasen-Bildern gegenüber ihrer Lage im gemessenen Amplituden- und im Phasenbild verschoben. Um diese Fehlerquelle beim quantitativen Vergleich zwischen Messung und Simulation zu umgehen, steht eine Funktion zur Verfügung, mit der die gemessenen Bilder in ihre ideale Position geschoben werden können. Diese Trägheitskorrektur wird durchgeführt, indem man die Bilder des Vorwärts- und Rückwärtsscans um dieselbe Strecke aufeinanderzu verschiebt, bis sie sich in der als ideal angenommenen Position treffen. Abbildung 5.3 zeigt einen Schnitt entlang einer Zeile vor und nach der Verschiebung. Hierbei mußten die Topographie-Bilder um 2 Å und die Amplituden- und Phasenbilder um 6 Å verschoben werden. Bei einer

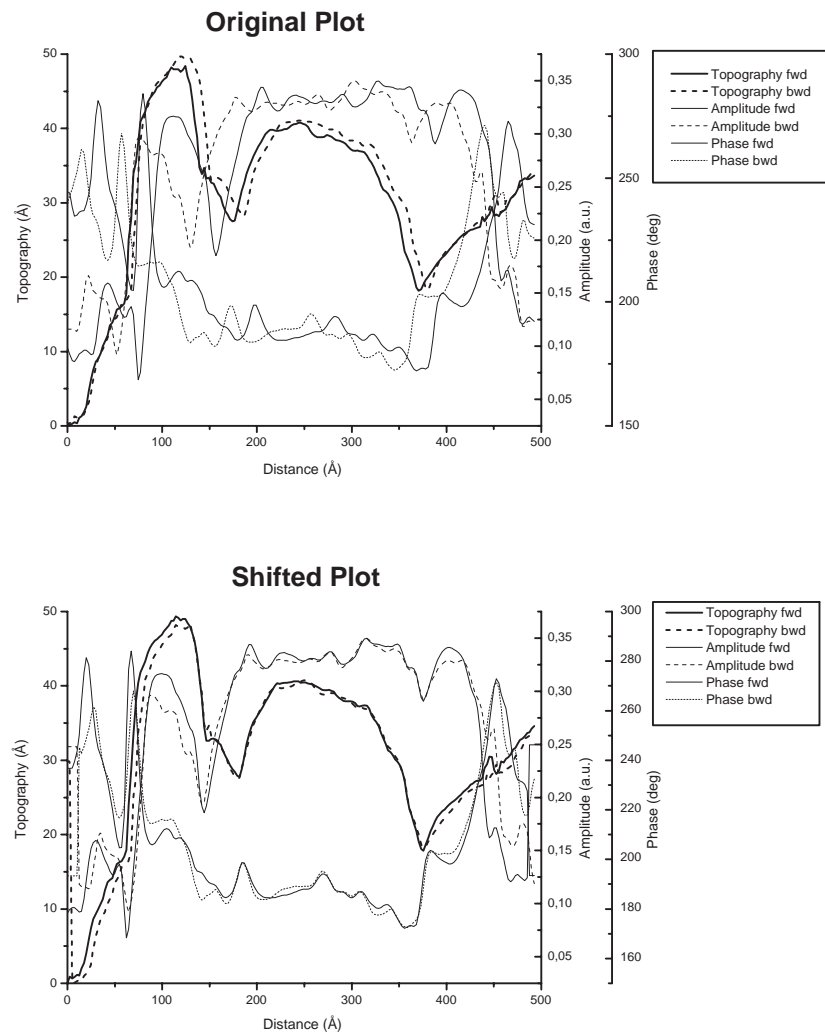


Figure 5.3: Schnittprofil in der schnellen Scanrichtung vor und nach der Trägheitskorrektur. Der horizontale Versatz zwischen den Profilen in Vorwärts- und Rückwärtsscan (Original Plot, fwd (engl. forward) bzw. bwd (engl. backward)) beruht im Falle der Topographie auf der Trägheit der Abstandsregelung, im Falle der Amplitude und Phase auf der endlichen Integrationszeit des Lock-In-Verstärkers. Das Hauptprogramm SAW-Viewer bietet die Möglichkeit, die Abweichung zwischen wahrer und gemessener Lage der Strukturen zu korrigieren.

Scangeschwindigkeit von 125 Å/s entspricht dies einer Zeitspanne von 48 ms. Dies steht im Einklang mit der Faustregel, daß der Lock-In-Verstärker eine Zeitkonstante, bei dieser Messung 30 ms, braucht, um sich auf einen neuen Meßwert zu stabilisieren.

Es besteht die Möglichkeit, die Daten aller vier Kanäle, deren Meßparameter und die Skalierungen der Falschfarbenskalen in einer Archiv-Datei zu speichern. Wird diese Datei später wieder geladen, wird das Programm in seinen Zustand zum Zeitpunkt des Speicherns zurückgesetzt. Dies ermöglicht es, mit Rohdaten, bearbeiteten und simulierten Daten einer früheren Sitzung

weiterzuarbeiten. Darüber hinaus können die Schnittprofile und die Falschfarbenbilder als Spreadsheet bzw. als JPEG-Bilddatei exportiert werden.

Bei der Planung der Programmstruktur des SAW-Viewers wurde großer Wert auf die Ergonomie gelegt. Damit der Benutzer mit einer minimalen Anzahl von Eingaben und Mausklicks die gewünschten Programmfunktionen starten kann, wurde das Konzept des Zustandsautomaten angewandt (Abb. 5.4). Dieser Programmteil registriert den Zustand der Benutzeroberfläche, der durch die Gesamtheit der Werte aller Eingabeelemente (Schieberegler, numerische Eingabefelder, Texteingabefelder, Cursor) gegeben ist. Alle 10 ms wird der aktuelle Zustand mit dem letzten Zustand verglichen. Im Falle einer Eingabe durch den Benutzer wird anhand der sogenannten "Zuordnungstabelle Eingaben" aus dem aktuellen Zustand und der Zustandsänderung die auszuführende Aktion bestimmt. Bedient der Benutzer zum Beispiel den Schieberegler für den maximalen von der Falschfarbenskala erfaßten Wert der Bildpunkte der Topographie-Bilder der vier Datenkanäle, werden die vier Bilder mit geänderter Farbskalierung automatisch neu gezeichnet. Der entscheidende Vorteil bei der Verwendung des Zustandsautomaten besteht darin, daß nicht zusätzlich auf einen Button "Neuzeichnen" geklickt werden muß. Diese Aktion "mit geänderter Farbskalierung neu zeichnen" wird nun von der "Zuordnungstabelle Aktionen" in eine Kette von Unteraktionen zerlegt. Diese sind die Berechnung der neuen Farbskala und die Darstellung der Topographie des ersten bis vierten Datenkanals. Da möglicherweise andere Aktionen, etwa die Glättung eines Bildes, mehrere dieser Unteraktionen umfassen können, wurde das Programmierkonzept der Queue¹ verwendet. Dabei sind die Unteraktionen als einzelne unabhängige Programmodule implementiert und können als Teil verschiedener Aktionen ausgeführt werden. Die auszulösende Aktion wird also gemäß der "Zuordnungstabelle Aktionen" in Unteraktionen zerlegt, die in die Queue eingefügt und vom Programm abgearbeitet werden. Ist die Queue leer, analysiert der Zustandsautomat die nächsten Eingaben des Benutzers, so daß schließlich neue Unteraktionen der Queue angefügt werden. Die Konzepte der Zustandsautomaten und der Queue wurden auch beim unten beschriebenen Programm "measure_phase_with_ellipse" angewandt.

5.3 Die Simulation von Amplituden- und Phasenbildern

Sind die Glättung und die Trägheitskorrektur der gemessenen Topographie erfolgt, können diese bearbeiteten Daten vom Hauptprogramm aus in das Unterprogramm "numerical_amp_phase" geladen werden. Hier werden entsprechend der Gleichung 4.53 das Amplituden- und das Phasen-Bild errechnet. Die dabei einzugebenden Wellenparameter sind die Ellipsenhypothense u_0 , die im allgemeinen den Defaultwert 1 behält, der in Gleichung 2.13 definierte Ellipsenwinkel β und der Winkel α zwischen Ausbreitungsrichtung und Scanrichtung. Zum qualitativen Vergleich mit der Messung werden die simulierten Daten an das Hauptprogramm übergeben. Zur Visualisierung der durch die Gleichungen 4.53

¹engl. Warteschlange

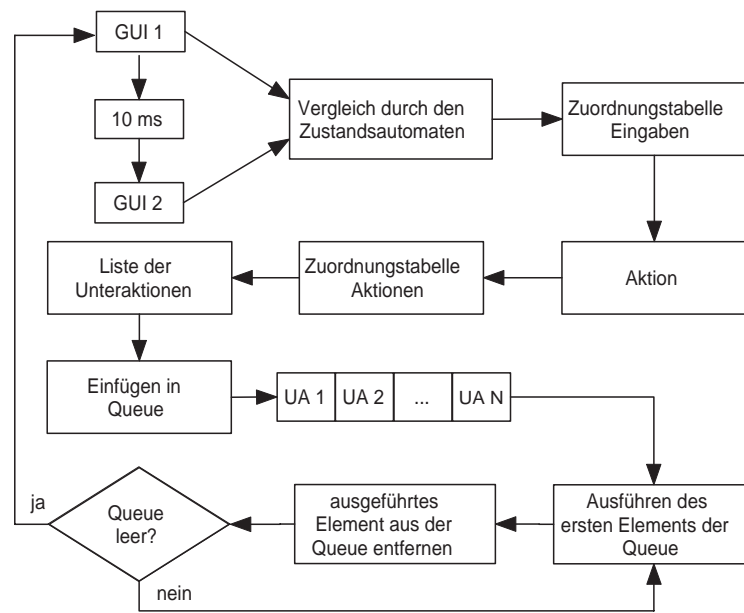


Figure 5.4: Flußdiagramm zu den Programmierkonzepten des Zustandsautomaten und der Queue. Der Zustandsautomat ermittelt nach der "Zuordnungstabelle Eingaben" aus dem Zustand und der Änderung der graphischen Benutzeroberfläche (GUI) die vom Benutzer beabsichtigte Aktion. Diese wird anhand der "Zuordnungstabelle Aktionen" in Unteraktionen (UA) zerlegt, die der Queue angefügt und vom Programm abgearbeitet werden.

beschriebenen Abhängigkeit von Amplitude und Phase von der Topographie und den Wellenparametern dient das Programm "analytical_amp_phase". Der Benutzer kann durch eine Eingabe der Scanparameter und einer Funktion $z = f(x, y)$ eine Topographie definieren, zu der anhand frei wählbarer Wellenparameter das Amplituden- und das Phasenbild berechnet werden. Der Vergleich solcher mit unterschiedlichen Wellenparametern simulierten Bilder erfolgt im Hauptprogramm.

5.4 Die Bestimmung des Ellipsenwinkels

Mit dem Programm "measure_ellipse_with_phase" (Abb. 5.5) lassen sich anhand der vom Hauptprogramm übergebenen SAW-STM-Bilder der Ellipsenwinkel und die Ausbreitungsrichtung bestimmen. Zu diesem Zweck errechnet das Programm den in Abschnitt 4.4.1 definierten Phasenkorrelationsfehler für eine Array von Wertepaaren (β_i, α_j) des Ellipsenwinkels und der Ausbreitungsrichtung. Das so erhaltene Fehlerfeld $h(\beta_i, \alpha_j)$ wird als Falschfarbenbild dargestellt. Hat das Fehlerfeld an einer Position $(\beta_{opt}, \alpha_{opt})$ ein Minimum, so ist dort die Übereinstimmung zwischen simulierter und gemessener Phase optimal. Die Koordinaten $\beta_{opt}, \alpha_{opt}$ dieses Minimums werden als optimale Wellenparameter bezeichnet und können vom Programm durch Minimalwertsuche bestimmt werden.

Mit der Maus kann der Benutzer eine Cursorposition $((\beta_{i_0}, \alpha_{j_0}))$ im Fehlerfeld definieren, mit deren Werten aus der Topographie das Phasenbild berechnet und als Falschfarbenbild im Dis-

play "Simulated Phase" dargestellt wird. Typischerweise setzt man hierbei den Cursor in das Minimum des Fehlerfeldes und vergleicht betrachtend das hierzu berechnete mit dem gemessenen Phasenbild im Display "Measured Phase". Auf einem Pentium-III-PC mit einer Taktfrequenz von 450 MHz erfolgt die Simulation des Phasenbildes so schnell, daß sie bei Bewegung des Cursors im Fehlerfeld als ein fast fließender Film betrachtet werden kann. Gleichzeitig werden zur aktuellen Position des Cursors der horizontale ($h(\beta)$ bei $\alpha = \text{const}$) und der vertikale Schnitt ($h(\alpha)$ bei $\beta = \text{const}$) dargestellt.

Variieren die elastischen Eigenschaften der Probe über den Scanbereich derart, daß der Ellipsenwinkel innerhalb des Scanbereiches nicht konstant ist, ist es interessant, die optimalen Wellenparameter in disjunkten Teilbereichen des Scanbereiches zu bestimmen. Hierzu bietet "measure_ellipse_with_phase" die Möglichkeit mit Cursors vier Rechtecke im Scanbereich zu definieren. In vier Datenkanälen werden die zugehörigen vier Fehlerfelder als Falschfarbenbild dargestellt. Hieraus werden die optimalen Wellenparameter berechnet und in der Registerkarte "Results" in Abb. 5.5 zusammen mit den zugehörigen Teilbereichen des Scanbereiches angezeigt. Wie im SAW-Viewer können mit der Maus vier Cursor, jeweils einer in einem Fehlerfeld, synchron bewegt werden, zum Beispiel um die absolute Lage der vier Minima zu vergleichen. Wie oben für nur ein Fehlerfeld beschrieben, werden die vertikalen und horizontalen Schnitte durch alle vier Fehlerfelder in einem Plot dargestellt. Erwartet der Benutzer nicht, daß sich aufgrund elastischer Inhomogenitäten der Ellipsenwinkel über den Scanbereich ändert, so ist die Abweichung zwischen den optimalen Wellenparametern der vier Teilbereiche statistischer Natur. Für diesen Fall bietet das Programm die Möglichkeit, als Gesamtergebnis die optimalen Wellenparameter und deren Fehler als Mittelwert bzw. Standardabweichung der Ergebnisse für die vier Teilbereiche zu berechnen.

Wie auch beim SAW-Viewer kann die Gesamtheit aller Eingabedaten und Ergebnisse in einer Archiv-Datei gespeichert und somit zu einem späteren Zeitpunkt wieder in das Programm geladen werden. Darüber hinaus hat der Benutzer die Möglichkeiten, die optimalen Wellenparameter und die entsprechenden Schnitte durch die Fehlerfelder als Spreadsheet zu importieren.

5.5 Die Auswertung atomarer Topographien

Wie in der Einleitung erklärt, lassen sich periodische Strukturen gegenüber dem Rauschen hervorheben, indem unerwünschte Fourierkomponenten des Bildes unterdrückt werden. Das Programm "FFT_filtering_of_numerical_data" berechnet zunächst aus dem vom Hauptprogramm SAW-Viewer übergebenen Bild $z(x, y,)$ (Abb. 5.6 (a)) die Fouriertransformierte $z^0(k_x, k_y)$, die als Falschfarbenbild dargestellt wird (Abb. 5.6 (b))². Im folgenden wird die Filterfunktion $g_{\text{filter}}(k_x, k_y)$ definiert, mit der $z^0(k_x, k_y)$ multipliziert wird, um die gewünschten

²Daß es sich hier um Funktionen mit diskretem Definitionsbereich handelt, wird in dieser Notation nicht berücksichtigt.

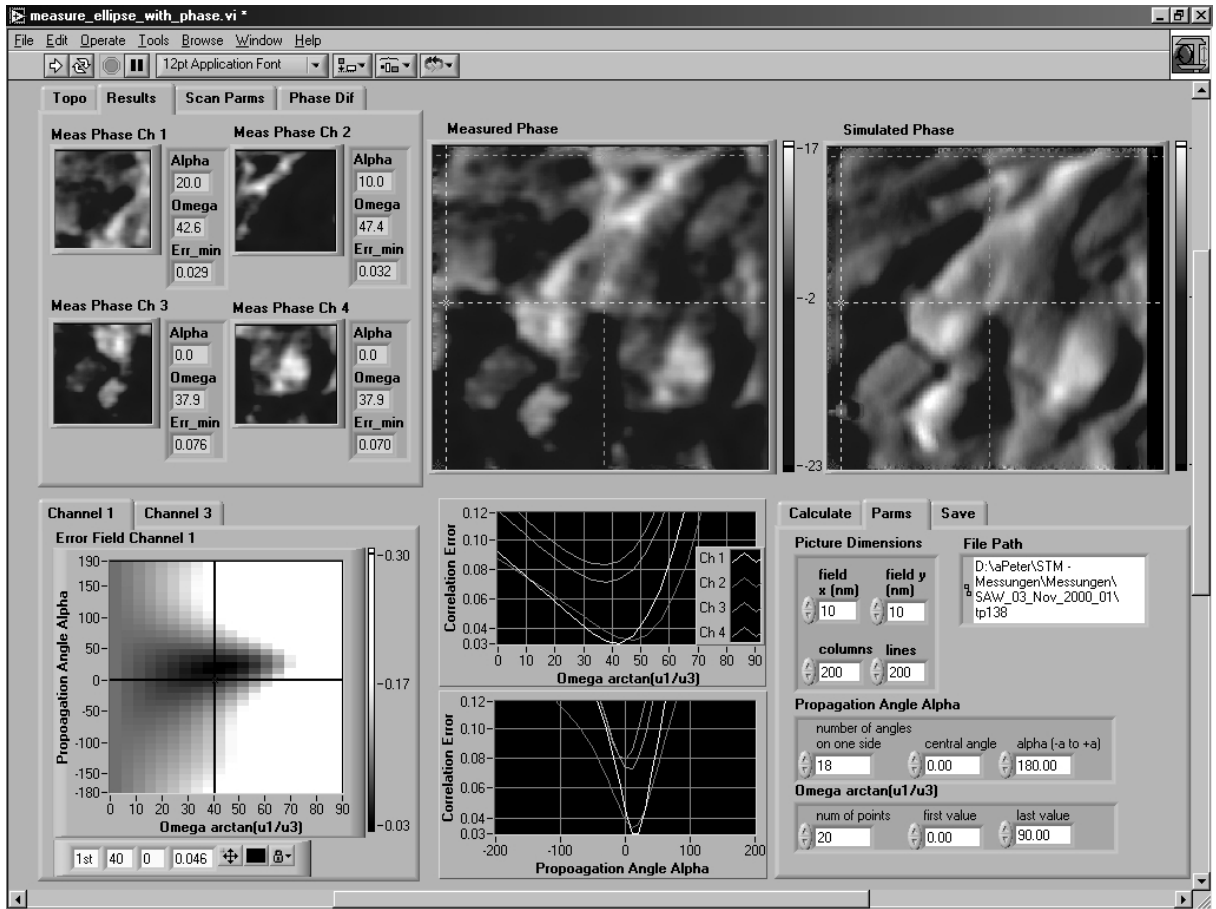


Figure 5.5: Graphische Benutzeroberfläche des Programmes "measure_ellipse_with_phase" zur Bestimmung des Achsenverhältnisses der Oszillationsellipse der Rayleighwelle. Im Fehlerfeld "Error Field Channel 1" wird die Abweichung zwischen simulierter und gemessener Phase für verschiedene Achsenverhältnisse und Ausbreitungsrichtungen dargestellt. Das Optimum dieser beiden Parameter wird durch das Minimum des Fehlerfeldes geliefert. Diese Rechnung wurde in den vier zur Verfügung stehenden Datenkanälen Channel 1, 2, 3, und 4 für die vier Quadranten des Phasenbildes durchgeführt. Zu den Displays für die Fehlerfelder der Kanäle 2 und 4 (nicht im Screenshot enthalten) gelangt der Benutzer durch Herunterscrollen. Die Plots (Mitte unten) zeigen den horizontalen und den vertikalen Schnitt an der Cursorposition durch die vier Fehlerfelder. optimalen Achsenverhältnisse und Ausbreitungsrichtungen zu den vier Quadranten sind in der Registerkarte "Results" (links oben) angezeigt.

Fourierkomponenten zu selektieren. Im Falle einer hexagonale Anordnung der Oberflächenatome markiert der Benutzer im Falschfarbenbild der Fouriertransformierten mit sechs Cursors die von der periodischen Struktur herrührenden Reflexe. Deren Koordinaten seien mit (k_{x_i}, k_{y_i}) , $i = 1 \dots 6$ bezeichnet. Außerhalb von Kreisscheiben eines einzugebenden Radius k_r um die 6 Punkte (k_{x_i}, k_{y_i}) gilt $g_{filter}(k_x, k_y) = 0$. Liegt (k_x, k_y) in der Kreisscheibe um den Punkt $(k_{x_{i_0}}, k_{y_{i_0}})$, so berechnet sich $g_{filter}(k_x, k_y)$ nach:

$$g_{filter}(k_x, k_y) = \cos\left(\frac{\pi}{2k_r}\right) \sqrt{(k_x - k_{x_i})^2 + (k_y - k_{y_i})^2} \quad (5.1)$$

Im letzten Schritt wird durch Rücktransformation der gefilterten Fouriertransformierten

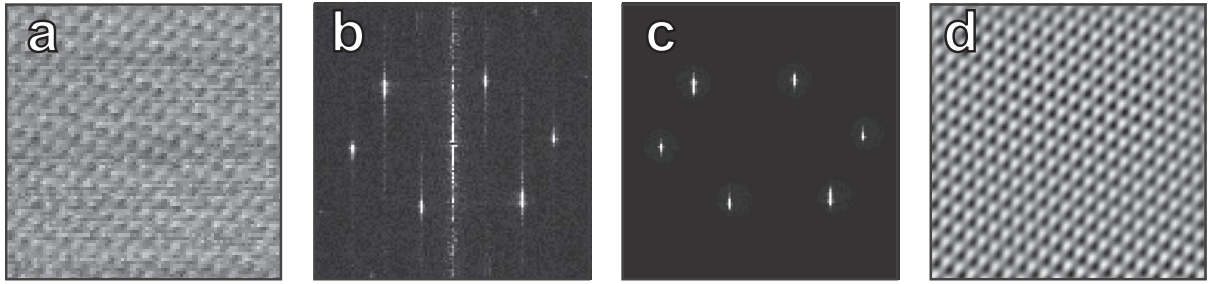


Figure 5.6: Bearbeitung eines Topographiebildes einer Graphitoberfläche. Das Programm "FFT_filtering_of_numerical_data" bildet die Fouriertransformierte (b) der gemessenen Topographie einer Graphitoberfläche (a). Die Fourierkomponenten, die nicht von der periodischen Struktur des Oberflächengitter herrühren, werden in der gefilterten Fouriertransformierten (c) zu Null gesetzt. Die Rücktransformation dieser gefilterten Fouriertransformierten in den realen Raum liefert das gefilterte Topographiebild, in dem die atomare Korrugation gegenüber Störungen hervorgehoben ist.

(Abb. 5.6 (c)) in den realen Raum das gefilterte Bild (Abb. 5.6 (d)) berechnet, dargestellt und zur weiteren Auswertung an das Hauptprogramm SAW-Viewer übergeben. Die gefilterte Topographie lautet:

$$z_{filter}(x, y) = F^{-1} \left\{ g_{filter}(k_x, k_y) z^0(k_x, k_y) \right\} \quad (5.2)$$

Durch die Wahl dieses rotationssymmetrischen Cosinus-Profiles ist g_{filter} an den Rändern der sechs Kreisscheiben stetig. Dies verhindert Artefakte in $z_{filter}(x, y)$, wie sie auftreten würden, wenn zum Beispiel die Filterfunktion die Summe aus sechs Zylinderprofilen wäre.

Das Programm "FFT_filtering_of_numerical_data" dient ebenfalls dazu, atomare Abstände des Topographiebildes einer Graphitoberfläche zum Zwecke der Kalibrierung des lateralen Maßstabes auszumessen (vergleiche Abschnitt 7.1.1). Anstatt einer Messung im realen Raum werden sie vom Programm aus den durch die sechs Cursors markierten Reflexe in der Fouriertransformierten berechnet. Das Topographiebild der Abbildung 5.6 zählt zu den Messungen, mit denen die Kalibrierung des lateralen Maßstabes durchgeführt wurde. Da es mit der werkseitigen Standardkalibrierung aufgenommen wurde, erscheint das atomare Gitter verzerrt, und die Reflexe der Fouriertransformierten bilden kein regelmäßiges Sechseck.

6 Experimenteller Aufbau

Bislang wurde das SAW-STM-Experiment nur an Luft durchgeführt. Zwar ist die Rastertunnelmikroskopie an Graphit und Edelmetallen bis hin zur atomaren Auflösung an Luft möglich, die Durchführung des Experimentes im Ultrahochvakuum verspricht jedoch entscheidende Vorteile: Über die Luft auf das STM übertragene Schwingungen entfallen, und die thermische Drift ist deutlich reduziert. Erst im UHV wird die Untersuchung reaktiver leitender Materialien möglich, weil bei Drücken unter 10^{-9} mbar mehrere Stunden vergehen, bis sich eine Monolage Fremdatome auf der Oberfläche gebildet hat. Obwohl das Tunneln von Elektronen durch dünne Oxidschichten hindurch zwar möglich ist, nimmt die Stabilität des Tunnelsignals ab; die Abbildung der atomaren Oberflächenstruktur ist dann kaum noch erreichbar. Aus demselben Grund muß die Präparation der Probe in derselben UHV-Anlage erfolgen, in der sie auch untersucht wird. Dies bringt auch für die Präparation der unreaktiven Goldschichten wesentliche Vorteile gegenüber der früher verwendeten Bedampfungsanlage, die bei einem Basisdruck von 10^{-6} mbar arbeitete: Das Substrat kann erstens durch Heizen von Verunreinigungen befreit werden. Zweitens ist der Restgasdruck gegenüber der Aufdampftrate so gering, daß auch bei langsamem Schichtwachstum die in die Schicht eingebauten Verunreinigungen minimal sind.

Wegen dieser deutlichen Verbesserung der Probenpräparation und der Meßbedingungen war es eine der Hauptaufgaben der vorliegenden Arbeit, die SAW-STM-Methode in das Ultrahochvakuum zu portieren. Dieses Kapitel erläutert das vorgefundene UHV-System einschließlich des Rastertunnelmikroskopes und beschreibt die in dieser Arbeit erfolgte Weiterentwicklung zum UHV-SAW-STM. So wurde das Pumpensystem für den UHV-Betrieb ausgebaut und eine elektronische Steuerung entwickelt, die ein zeitsparendes Ausheizen der Kammer ermöglicht. Zur Probenpräparation im UHV wurde ein Elektronenstrahlverdampfer in das System integriert. Der im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Aufbau der Probe gewährleistet gleichzeitig einen freien Probentransfer innerhalb der Kammer und die automatische Kontaktierung im Probenhalter des STM. Schließlich wurde das STM um eine Hochfrequenz-Verkabelung erweitert, mit der SAWs im Bereich bis mindestens 400 MHz angeregt werden können. Hinsichtlich des Probenmaterials, der SAW-Frequenz und der Anzahl der angeregten SAWs wurde bei den Umbauten Wert auf die Erweiterbarkeit für zukünftige Experimente gelegt.

6.1 Die UHV-Anlage, Probenmanipulation

Mit der verwendeten UHV-Anlage (Abb. 6.1) ist es möglich, Metallfilme in situ mit Hilfe eines Elektronenstrahlverdampfers zu präparieren und strukturelle Untersuchungen mit dem Rastertunnelmikroskop durchzuführen. Darüber hinaus erlaubt es ein eigens entwickelter Probentransfermechanismus, Metallfilme im Ultrahochvakuum auf Oberflächenwellen-Bauelementen herzustellen. Mit einem System von Hochfrequenz-Durchführungen und

Koaxialkabeln können auf solchen SAW-Proben akustische Oberflächenwellen angeregt werden, deren Ausbreitung auf dem Metallfilm mit dem STM untersucht wird.

Die UHV-Anlage besteht aus der Schleusenkammer, der Präparationskammer und der STM-Kammer, die durch UHV-Balgzugschieber gegeneinander abgeschottet werden können. Über einen Bypass-Wellenbalg läßt sich somit jede Kammer einzeln evakuieren. Die Probe ist auf einem Probenhalter befestigt, der wiederum auf einer Probenhaltertrommel sitzt. Diese wird durch einen aufgeschraubten CF-Blindflansch eingeschleust und mit einem Bajonettverschluß an der Spitze des Transferstabes befestigt. Dort kann sie von der Probenheizlampe ausgeheizt werden. Mit dem Transferstab wird die Probenhaltertrommel nach dem Evakuieren in die Präparationskammer geschoben und auf den Probenmanipulator übergeben. Dabei wird die Probenhaltertrommel von zwei Bajonettverschlüssen gleichzeitig gehalten, bis der Experimentator den Transferstab abkoppelt und die Probe mit dem Probenmanipulator in die Bedampfungsposition bringt. Nach der Bedampfung übernimmt der Transferstab die Probenhaltertrommel und transportiert sie in die STM-Kammer. Dort wird dann mit einer Greifvorrichtung am Ende eines Wobblesticks der Probenhalter, der auch eine neu eingeschleuste Spitze tragen kann, in das Probenkarussell gesetzt. In ihm können bis zu acht Proben oder STM-Spitzen aufbewahrt werden. Mit dem Wobblestick werden schließlich die Spitze und der Probenhalter in das STM gesetzt.

6.2 Das Pumpensystem

Als die Vakuum-Kammer am Anfang dieser Arbeit übernommen wurde, war das Pumpensystem nur für Experimente im Hochvakuum dimensioniert. Das Evakuieren der Kammer bis zu einem Basisdruck $p < 10^{-9}$ mbar einschließlich des Ausheizens dauerte mehrere Tage. Daher wurden im Rahmen dieser Arbeit stärkere Pumpen beschafft und in das bestehende System integriert (Abb. 6.2). Die Kammer wird von einem zweistufigen Pumpensystem bis in den Druckbereich 10^{-5} mbar evakuiert. Um das Pumpensystem ölfrei zu halten, wurde die vorgefundene Drehschieberpumpe durch eine Membranpumpe des Typs Pfeiffer MZ 2T (Saugleistung 0.6 l/s) ersetzt. Sie liefert das Vorvakuum für die Turbopumpe Pfeiffer TMU 261 (N_2 -Saugleistung 210 l/s), die über ein Schiebeventil mit der Schleusenkammer verbunden ist. Bei Drücken unter 10^{-6} mbar werden die Präparations- und die STM-Kammer von jeweils einer Ionengetterpumpe gepumpt. Es handelt sich um die Typen Physical Instruments DI 480 (N_2 -Saugleistung 465 l/s) bzw. Varian VacIon Plus 150 (N_2 -Saugleistung 150 l/s), die beide mit jeweils einer mit flüssigem Stickstoff kühlbaren Titan-Sublimations-Pumpe kombiniert sind. Um die Ionengetterpumpen beim Belüften der Kammer nicht fluten zu müssen, können sie mit Schiebeventilen abgetrennt werden. Ein Bypass-System ermöglicht es, entweder die Präparations- oder die STM-Kammer zu belüften und wieder zu evakuieren, ohne das Vakuum in der jeweils anderen Kammer zu brechen.

Die Druckmessung im Vorvakuum erfolgt mit einem Wärmeleitungsmanometer an der

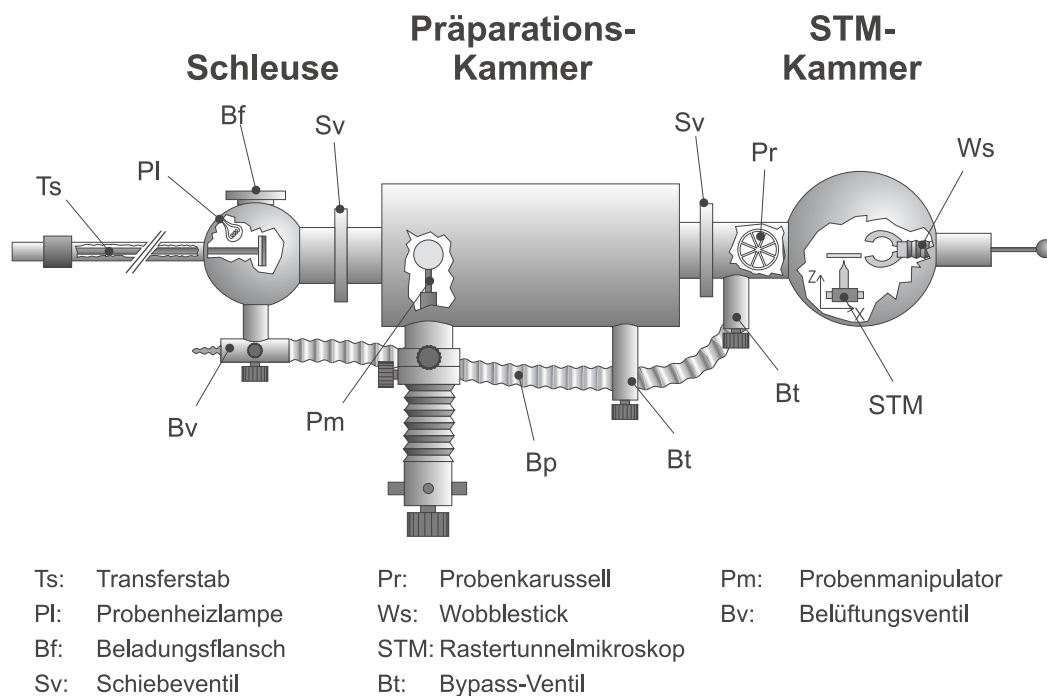


Figure 6.1: Draufsicht der UHV-Anlage. Mit dem Transferstab wird die Probe von der Schleuse zur Bedampfungsposition an der Spitze des Probenmanipulators und zum Probenkarussell bewegt. Acht Proben bzw. STM-Spitzen können im Probenkarussell aufbewahrt und mit dem Wobblestick in das STM gesetzt werden.

Schleuse. Ab einem Druck von 10^{-5} mbar kommen die Bayard-Alpert-Ionisationsmeßröhren zum Einsatz. Zur Analyse des Restgasspektrums dient das Massenspektrometer an der Präparationskammer.

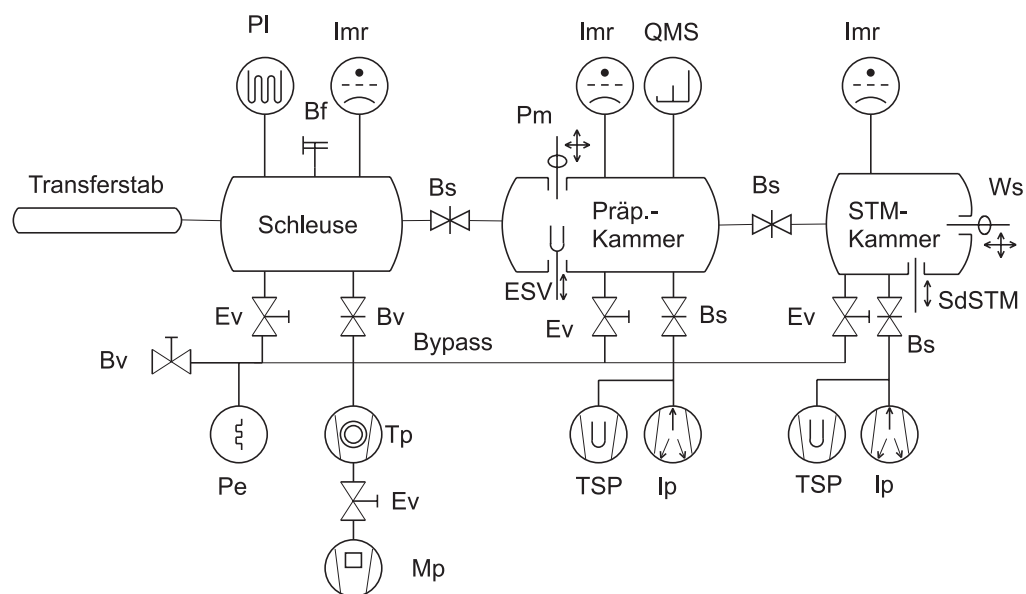
Zu den Erweiterungen und Umbauten, die im Rahmen dieser Arbeit am Pumpen- und Druckmeßsystem vorgenommen wurden, zählen die Pumpensysteme an der Schleusen- und an der Präparationskammer, das Massenspektrometer sowie zwei der drei Ionisationsmeßröhren.

6.3 Das Ausheizen der Kammer

Um in der UHV-Anlage den gewünschten Enddruck von 1×10^{-10} mbar zu erzielen, muß die Kammer ausgeheizt werden. Bei Raumtemperatur bewirkt die fortlaufende Desorption von Adsorbaten an den Kammerwänden, daß Drücke unter $p < 10^{-8}$ mbar erst nach vielen Tagen erreicht werden. Beim Ausheizen wird diese Desorption beschleunigt, so daß innerhalb weniger Stunden der Adsorbatvorrat erschöpft ist. Nach dem Abkühlen der Kammer stellt sich daher dem Gleichgewicht zwischen dem Dampfdruck der Materialien der Innenwände und der Saugleistung der Pumpen entsprechend idealerweise ein Druck im Bereich $1 - 5 \times 10^{-10}$ mbar ein. Die Kammer wird von mehreren temperaturgeregelten Heizbändern

erhitzt und mit feuerfesten Isolierdecken umhüllt. Thermoelemente messen die Temperatur in der Nähe eines jeden Heizbandes. Als Solltemperatur wurde in der Regel 200°C gewählt. Wegen der Temperaturempfindlichkeit der Vitondichtungen und der Piezo-Elemente mußten die Schiebeventile und die STM-Kammer bei einer niedrigeren Temperatur (180°C bzw. 130°C) ausgeheizt werden.

Beim Ausheizen besteht die Gefahr, daß durch die Desorption der Druck so stark ansteigt, daß sich die Ionengetterpumpen ausschalten, um eine Überlastung ihrer Hochspannungsquelle oder eine Gasentladung zu verhindern. In diesem Falle kann der Druck so stark weitersteigen, daß die heißen Innenwände der Kammer Verbindungen mit den Restgasteilchen eingehen, was zu einer dauerhaften Kontaminierung der Kammer führt. Aus demselben Grund muß das Heizen beendet werden, falls eine Pumpe ausfällt. Um den Experimentator von der Kontrolle des Ausheizvorgangs zu entlasten, wurde im Rahmen dieser Arbeit zusammen mit der Elektronik-Werkstatt des Instituts eine Ausheizsteuerung entwickelt. Sie versorgt die Heizbän-



Mp: Membranpumpe
Tp: Turbomolekularpumpe
Ip: Ionengetterpumpe
TSP: Titan-Sublimations-Pumpe
Imr: Ionisationsmeßröhre
Pe: Pirani-Element
QMS: Quadrupol-Massenspektrometer
PI: Probenheizlampe

Bf: Beladungsfenster
Bv: Belüftungsventil
Bs: Balgzugschieber
Ev: Eckventil
Pm: Probenmanipulator
ESV: Elektronenstrahlverdampfer
SdSTM: Schiebedurchführung STM
Ws: Wobblestick

Figure 6.2: Das Pumpen- und Druckmeßsystem der UHV-Anlage. Die Schleuse, die Präparationskammer und die STM-Kammer können mit Schiebeventilen voneinander abgeschottet werden. Der Bypass ermöglicht ein getrenntes Belüften und Abpumpen der STM-Kammer.

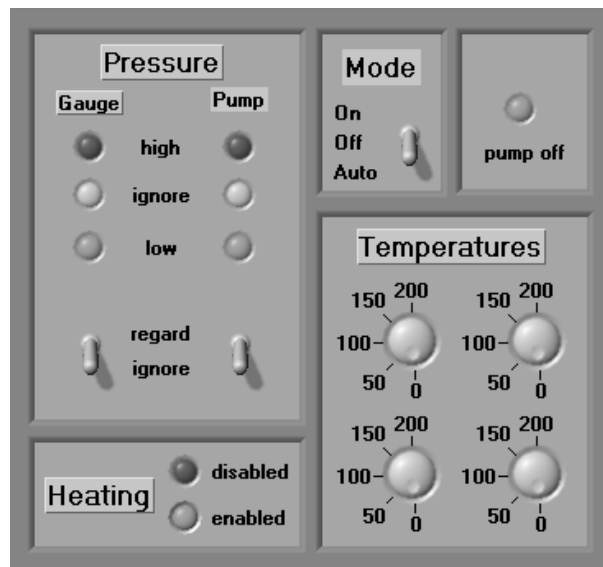


Figure 6.3: Frontplatte eines Kanals der Ausheizsteuerung. Ein Kanal steuert die vier temperaturgeregelten Steckdosen, die die Heizbänder einer Teilkammer versorgen. Die Solltemperaturen dieser vier Temperaturregler werden mit den Drehreglern im Feld "Temperatures" eingestellt. Ob die Netzspannung am Eingang der Temperaturregler dauerhaft eingeschaltet ("On") bzw. ausgeschaltet ("Off") ist, oder ob sie je nach gemessenen Drücken angelegt sein soll ("Auto"), wird über den Schalter "Mode" festgelegt. Die Leuchtdioden im Anzeigefeld "Heating" geben über den Zustand der Eingangsspannung der Temperaturregler Auskunft. Im Betriebsmodus "Auto" können die Druckmessungen der Ionisationsmeßröhre und der Pumpe mit den Schaltern im Bedienfeld "Pressure" ignoriert werden. Leuchtdioden zeigen an, ob die gemessenen Drücke beachtet werden und ob sie über oder unter dem Setpoint liegen. Sollte die Pumpe der betreffenden Teilkammer ausgefallen sein, ist die Leuchtdiode "pump off" aktiv.

der der UHV-Anlage unter Beachtung von Druck, Temperatur und Zustand der Pumpen mit der Netzspannung.

Damit es möglich ist, die drei Teilkammern getrennt auszuheizen, ist die Ausheizsteuerung in die Kanäle Schleuse, Präparationskammer und STM-Kammer untergliedert. Abb. 6.3 zeigt die Frontplatte eines Kanals. Für die Heizbänder stehen pro Kanal vier Steckdosen zur Verfügung, die von jeweils einem Temperaturregler entsprechend der Temperatur des zugehörigen Thermoelements geschaltet werden. Jeder Kanal erfaßt den Druck der Teilkammer über die Relaisausgänge des Steuergerätes der Ionisationsmeßröhre und der Ionengetterpumpe. Dabei schließt das Steuergerät den Relaiskontakt, wenn ein als Setpoint eingegebender Druck unterschritten wird. Der Kontakt wird erst dann wieder geöffnet, wenn der Druck auf eine bestimmte Differenz über dem Setpoint gestiegen ist. Diese Hysterese sichert die Stabilität des Relaisausganges im Falle schwankender Drücke. Sollte eine Pumpe oder eine Röhre ausfallen, wird der Relaiskontakt automatisch geöffnet und somit der Ausheizsteuerung der Zustand "Druck über dem Setpoint" mitgeteilt. Als zusätzliche Sicherheit werden die Relaisausgänge der Pumpensteuerungen ausgelesen, die anzeigen, ob die Pumpe in Betrieb ist.

Die Funktionalität der Ausheizsteuerung ist am Beispiel eines Kanals im Flußdiagramm Abb. 6.4 dargestellt. Zur Vereinfachung ist nur eine Steckdose eingezeichnet. Generell kön-

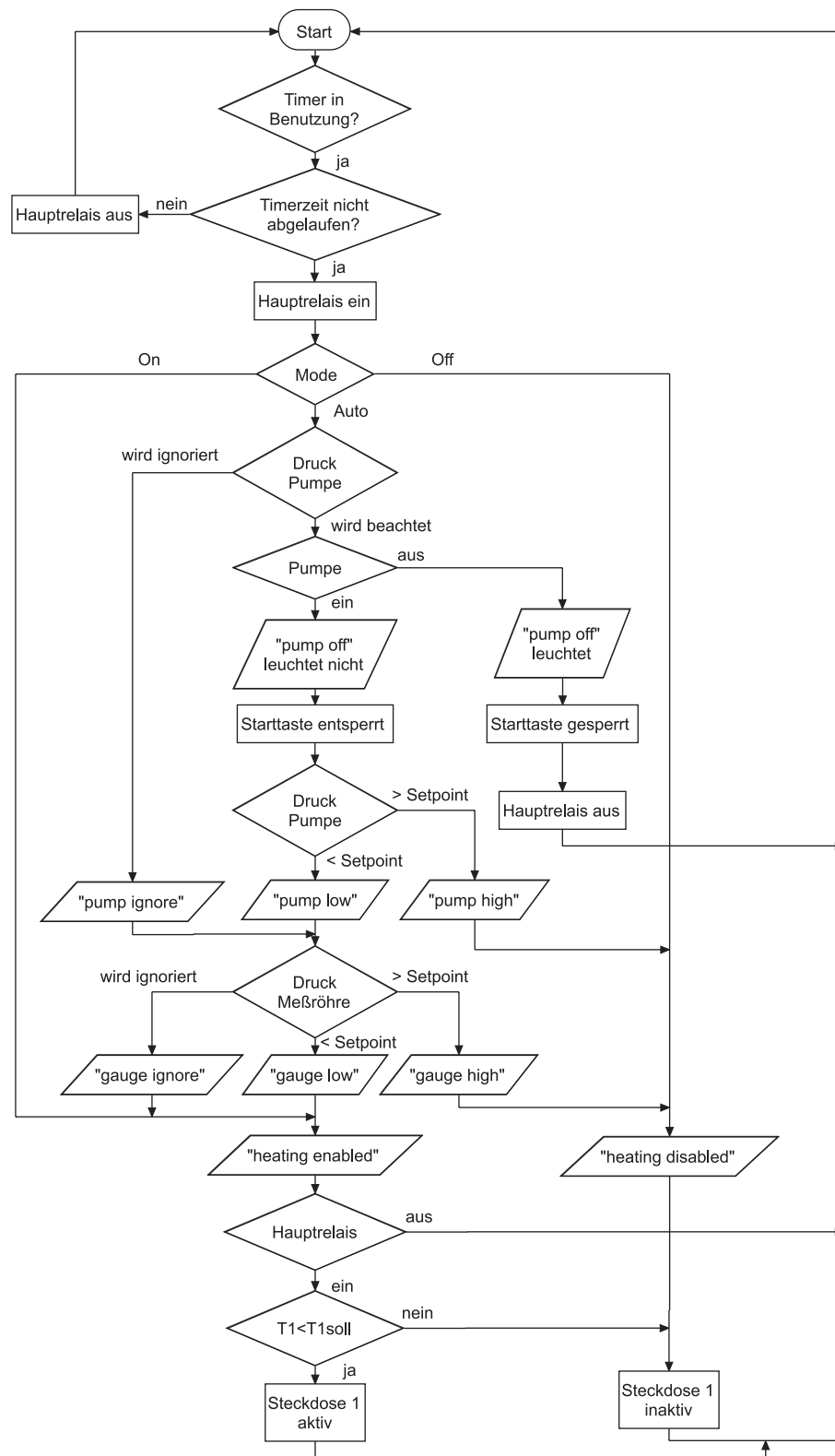


Figure 6.4: Flußdiagramm der Ausheizsteuerung. Die Ausheizsteuerung der UHV-Anlage schaltet den Strom der Heizbänder und entlastet somit den Experimentator von der Kontrolle des Ausheizvorganges. Auf der Grundlage des Vergleiches der erfaßten Meßgrößen (Drücke der UHV-Kammer, Temperaturen der Kammeraußenwände und Betriebszustand der Pumpen) mit den eingestellten Sollwerten entscheidet die Ausheizsteuerung, welche Heizbänder aktiv sind. Das Flußdiagramm zeigt nur einen der drei Kanäle zum Ausheizen der drei Teilkammern der UHV-Anlage.

nen die Steckdosen nur dann aktiviert werden, wenn das sogenannte Hauptrelais geschlossen ist. Dies geschieht durch Betätigen der Starttaste, sofern diese nicht gesperrt ist. Entsprechend kann der Experimentator das Hauptrelais, etwa im Falle eines Notaus, mit der Stoptaste öffnen. Das Ausheizen kann mit Hilfe eines Timers nach der eingestellten Zeit beendet werden. Wird die Timerfunktion verwendet, ist das Hauptrelais geschlossen, bis die Timerzeit abgelaufen ist. Damit die automatische Auswertung der Drücke bei Bedarf umgangen werden kann, hat jeder Kanal der Ausheizsteuerung drei Betriebsarten: Im Modus "On" bzw. "Off" sind die vier temperaturgeregelten Steckdosen - abhängig vom Hauptrelais - dauerhaft aktiv ("heating enabled" leuchtet) bzw. inaktiv ("heating disabled" leuchtet). Im Modus "Auto" kann eingestellt werden, ob der von der Ionisationsmeßröhre und/oder der von der Pumpe gemessene Druck beachtet werden soll. Wird der Pumpendruck beachtet und ist die Pumpe ausgeschaltet, so leuchtet "pump off", die Starttaste wird gesperrt und das Hauptrelais geöffnet; man kann die Heizung im Modus "Auto" bei beachteter Pumpe nicht anschalten, solange sie nicht läuft. Anderenfalls bleibt die Leuchte "pump off" dunkel und die Starttaste entsperrt. Sofern der Röhren- und/oder der Pumpendruck nicht ignoriert werden, gelangt man in den Zustand "heating enabled" nur dann, wenn sie kleiner als der entsprechende Setpoint sind. Leuchten zeigen an, ob der Röhren- oder der Pumpendruck ignoriert werden, bzw. unter oder über dem Setpoint liegen. Ist das Hauptrelais geschlossen und besteht der Zustand "heating enabled", ist die Temperatursteuerung aktiv; jede Steckdose des betreffenden Kanals liefert also die Netzspannung, wenn die Solltemperatur noch nicht erreicht ist.

Der entscheidende Nutzen der Ausheizsteuerung besteht darin, daß in der Betriebsart "Auto" der Experimentator den Ausheizvorgang nicht zu kontrollieren braucht. Bei zu starkem Druckanstieg wird das Heizen bei geschickter Wahl der Setpoint-Drücke unterbrochen, bevor die Pumpen überlastet sind und sich ausschalten. Ist der Druck wieder unter den Setpoint-Druck gefallen, wird der Ausheizvorgang automatisch fortgesetzt.

6.4 Die Präparation der Schichten

Damit aus den in der Einleitung beschriebenen Gründen die zu untersuchenden Metallschichten im UHV präpariert werden können, wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Elektronenstrahlverdampfer beschafft (E-Flux der Firma Tectra). Elektronenstrahlverdampfer sind die Standardquelle für die Präparation von Metallschichten. Prinzipiell hätte für die hier herzustellenden Goldschichten die vorhandene Effusionszelle verwendet werden können. Hiervon wurde jedoch Abstand genommen, weil die Abmessungen des Tiegels eine Beladung mit übermäßig großen Goldmengen erfordert hätte. Die Präparation höherschmelzender Metalle, wie etwa Platin, in zukünftigen Experimenten ist mit Effusionszellen nicht möglich.

6.4.1 Der Elektronenstrahlverdampfer

Beim Elektronenstrahlverdampfer wird der Tiegel durch Elektronenbeschuß bis zur Schmelztemperatur des zu verdampfenden Materials erhitzt. Es wurde ein selbstgebauter Tiegel aus thoriertem Wolfram verwendet. Das Filament ist ein Wolframdraht vom Durchmesser 0.3 mm, der in eineinhalb Windungen kontaktlos um den Tiegel gewickelt ist und von einem Strom im Bereich 5 bis 6 mA zum Glühen gebracht wird. Die dabei emittierten Elektronen werden vom Massepotential des Filaments zum Tiegel beschleunigt, an dem eine Spannung von typischerweise 1-2 kV anliegt. Der Elektronenstrom liegt im Bereich 15 bis 25 mA. Aus der Geometrie der Austrittsblende des Elektronenstrahlverdampfers ergibt sich ein Öffnungswinkel des Atomstrahls von $\pm 15^\circ$.

Im Betrieb des Verdampfers desorbieren Fremdatome aus dem Filament, dem Tiegelmaterial und der sich ebenfalls aufheizenden Umgebung des Tiegels und erhöhen den Restgasdruck. Da diese Fremdatome insbesondere bei geringen Aufdampfraten den wachsenden Film kontaminieren, muß der Elektronenstrahlverdampfer vor dem Betrieb ausgegast werden. Dies geschieht durch Ausglühen des Filamentes und durch Erhitzen des Tiegels bis zu einer gerade meßbaren Aufdampfrate bei verdeckter Probe. Die Erhitzung der Umgebung des Tiegels wird durch eine Wasserkühlung verringert. Es konnte im Betrieb ein Restgasdruck von 3×10^{-8} mbar erzielt werden.

Mehrere funktionelle Schwächen des gekauften Gerätes mußten durch konstruktive Eingriffe behoben werden: So wurde der thermische Kontakt zwischen dem Wasserkühlblock und dem Hitzeschild verbessert. Die Kurzschlußanfälligkeit bei thermischer Expansion wurde durch Umbauten vermindert. Schließlich wurden mehrere Lecks an Schweißnähten der Wasserkühlung behoben.

6.4.2 Die Bedampfungseinrichtung

Zur Bedampfung wird die Probe mit dem Probenmanipulator, der in alle drei Raumrichtungen bewegt und um seine Längsachse gedreht werden kann, in die Strahlachse des Elektronenstrahlverdampfers gebracht. Wie oben beschrieben, sitzt der Probenhalter mit der Probe in der Probenhaltertrommel, die über einen Bajonettverschluß vom Kopf des Probenmanipulators gehalten wird. Die Probe wird von der Bedampfungsmaske bedeckt, die nur das zu bedampfende Gebiet der Probe dem Atomstrahl aussetzt und somit einen Kurzschluß der Interdigitalwandler verhindert. Im Kopf des Probenmanipulators ist ein Filament integriert, das während des Bedampfens den Probenhalter über eine rückwärtige Öffnung in der Probenhaltertrommel erhitzt. Um ein Ausgasen zu verhindern, ist der Kopf des Probenmanipulators über eine Kupferlitze mit einer Wasserkühlung verbunden. Zur Regelung der Proben temperatur wird eine Steuerelektronik vom Typ "Eurotherm" verwendet; die Temperaturmessung erfolgt über ein Thermoelement im Strahlengang des Filamentes.

Der Elektronenstrahlverdampfer ist auf einem Clusterflansch (CF 200) montiert, der vier

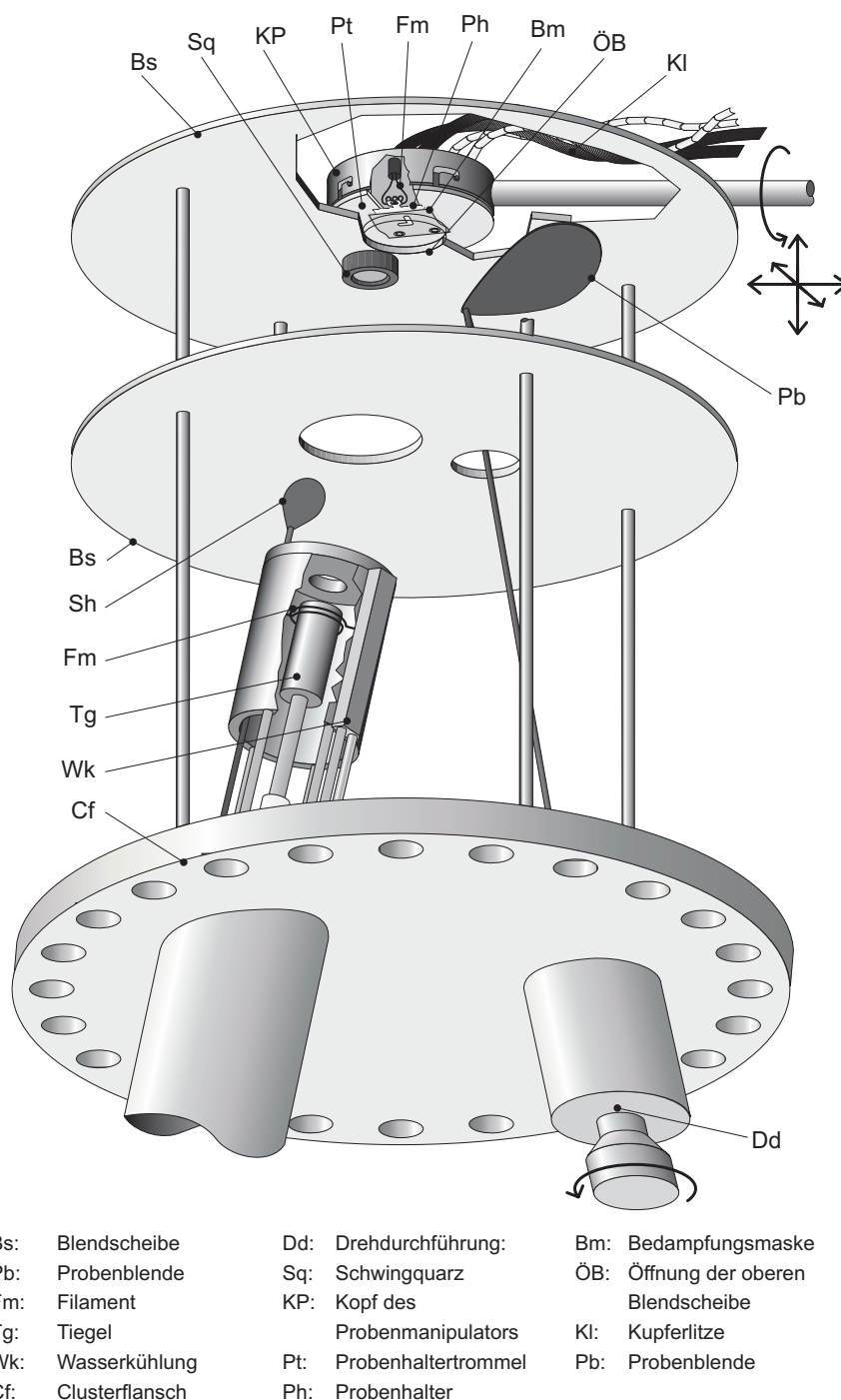


Figure 6.5: Die Bedampfungseinrichtung. Der Elektronenstrahlverdampfer, die Probenblende und die Blendscheiben sind auf einem Clusterflansch montiert. Die rückseitig erhitze Probe befindet sich am Kopf des Probenmanipulators hinter der Bedampfungsmaske.

Rohrstücke trägt, die auf die Probe gerichtet sind. Für zukünftige Experimente können daher bei Bedarf die nicht besetzten Rohrstücke mit zusätzlichen Geräten belegt werden. Denkbar sind der Einsatz einer Sputter-Kanone zur Reinigung der Probenoberfläche und einer Effusionszelle zur Herstellung von Schichten niederschmelzender Materialien. Um das Bedampfen der Kammerinnenwände zu verhindern, sind auf dem Clusterflansch an vier Gewindestangen zwei parallele Bedampfungsblenden montiert (Abb. 6.5). Kreisförmige Ausfräsungen geben den Weg des Atomstrahles und der Drehachse der Probenblende frei, mit dem der Atomstrahl auf Höhe der oberen Bedampfungsblende blockiert werden kann. Die Bedampfungsrate wird mit einem Schwingquarz gemessen, der direkt neben der Öffnung in der oberen Bedampfungsblende befestigt dem Atomstrahl ausgesetzt ist. Indem man mit der Probenblende nur diese Öffnung, nicht aber den Schwingquarz verdeckt, kann man bei geschützter Probe die Bedampfungsrate einstellen. Die Öffnung in der oberen Bedampfungsblende wird von einer Justageblende verdeckt, die mit einem Loch vom Durchmesser 4 mm versehen ist und somit den Atomstrahl auf diesen Durchmesser begrenzt. Durch Verschieben dieser Blende wird die Bedampfungsposition der Probe festgelegt. Das Ensemble des Elektronenstrahlverdampfer, des Schwingquarzes, des Probenblende und der Bedampfungsblenden wurde im Rahmen dieser Arbeit entwickelt; die gemeinsame Montage auf dem Clusterflansch ermöglicht es, dieses Ensemble zu Wartungszwecken durch Lösen des Clusterflansches vom Rest der UHV-Anlage zu demontieren.

6.4.3 Der Probenchip

In dieser Arbeit wurde als Probenchip (vergleiche Abb. 6.7) eine Verzögerungsleitung, also eine Anordnung gegeneinander gerichteter Interdigitalwandler, verwendet. Die Arbeitsfrequenz f_0 lag bei 40 MHz, was einer Wellenlänge von $88 \mu\text{m}$ entspricht. Das Substrat ist ein LiNbO_3 -Wafer, der in der Y-Ebene geschnitten ist; die Wandlerachse verläuft in Z-Richtung. Um Reflexionen an den Kanten des Chips zu verhindern ist er als ein Parallelogramm mit einem Scherwinkel von 7° vereinzelt. Um Reflexionen an den Fingern zu vermeiden, ist das sogenannte Splitfinger-Design angewendet worden. Hierbei besteht jede Finger-Elektrode aus zwei Fingern; die reflektierenden Fingerkanten sind so angeordnet, daß sich die reflektierten Teilwellen destruktiv überlagern. Die Metallisierung ist eine 40 nm dicke Goldschicht, die mit einem Elektronenstrahlverdampfer bei einer Rate von 20 \AA/s abgeschieden wurde. Als Haftvermittler zum LiNbO_3 -Substrat dient eine 5 nm dicke CrNi-Schicht. Diese Fertigungsschritte erfolgten vor dem Einschleusen des Probenchips in die UHV-Anlage. Erst im UHV wird das in Abb. 6.7 eingezeichnete, aus Gold bestehende in-situ-Tunnelpad, an dem das SAW-STM durchgeführt wird, präpariert. Hierbei kommt die in Abschnitt 6.4.2 erläuterte Bedampfungseinrichtung zum Einsatz. Vor dem Bedampfen wurde die Probe zur Säuberung für 20 min auf einer Temperatur von 250°C gehalten. Bei dieser Substrattemperatur, einem Druck von $6 \times 10^{-8} \text{ mbar}$ und einer Rate von durchschnittlich 0.6 \AA/s wurde mit dem Elektronenstrahlverdampfer die 2000 \AA dicke Goldschicht hergestellt.

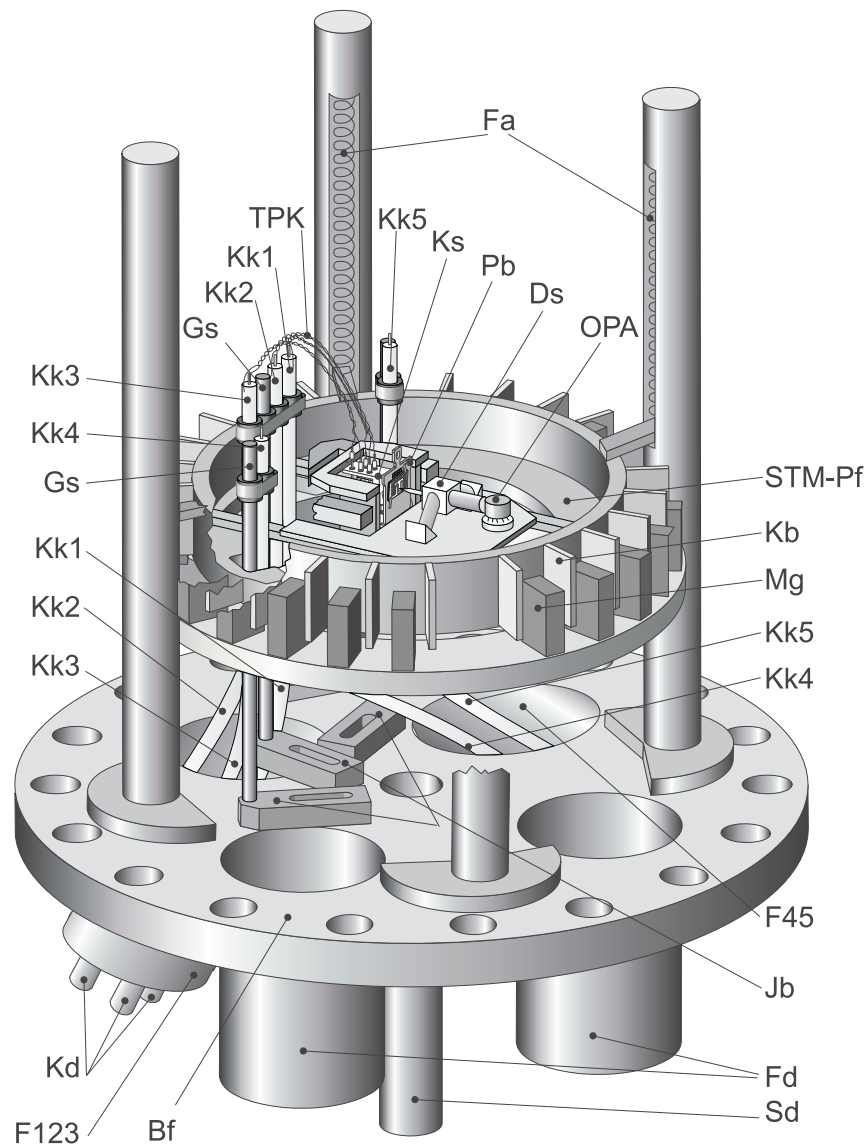
6.5 Das SAW-STM

6.5.1 Das Omicron-STM und die Zielsetzung des Umbaus zum SAW-STM

Als Grundlage für das entwickelte SAW-STM diene das bereits vorhandene kommerzielle STM1 der Firma Omicron (Abb. 6.6). Es arbeitet im UHV bei Raumtemperatur und ist bis 130°C ausheizbar. Die STM-Spitze ist auf einem Dreibein-Scanner montiert, der einen maximalen Scanbereich von $300 \times 300 \text{ nm}^2$ ermöglicht. Der Probenhalter, auf dem die Probe montiert ist, befindet sich senkrecht in der Probenaufnahme; diese kann zur Grobannäherung mit Stick-and-Slip-Motoren in beide horizontalen Raumrichtungen bewegt werden. Über eine Klemmverbindung ist die STM-Spitze in dem Spitzenhalter befestigt. Spitzenhalter und Probenhalter können mit dem Wobblestick an einer Öse gegriffen und somit zwischen dem Probenkarussell und dem STM transportiert werden. Dies ermöglicht den Wechsel von Spitze und Probe im UHV. Abb. 6.6 zeigt das STM1 nach dem Umbau, läßt aber die originale Konstruktion erkennen: Das Ensemble aus Probenaufnahme und Dreibein-Scanner steht auf der STM-Plattform, die zur Schwingungsisolierung gegenüber dem Körperschall der UHV-Kammer an vier Federn aufgehängt ist. Sie sind in vier Säulen integriert, die auf einem horizontal an die Kammer geschraubten 200 mm CF-Basisflansch montiert sind. Mögliche Schwingungen der STM-Plattform werden von einer Wirbelstrombremse gedämpft. Sie besteht aus einem Kranz von Kupferblechen um die STM-Plattform, die sich ohne mechanischen Kontakt zwischen fest mit den Säulen verbundenen Magneten bewegen. Die Resonanzfrequenz dieses Systems beträgt ungefähr 1 Hz. Als zweite Stufe der Schwingungsisolierung wird die gesamte UHV-Kammer von drei schwingungsgedämpften Füße getragen. Um die Übertragung von Körperschall weitgehend zu unterdrücken, wurden vor den Messungen alle verzichtbaren Kabel zur UHV-Anlage entfernt. Durch eine Schaumstoffaufhängung wurden Schwingungen an den verbleibenden Kabeln gedämpft.

Der Basisflansch trägt zwei CF40-Flansche mit elektrischen Durchführungen zum STM und einen CF20-Flansch mit einer Schiebedurchführung. Mit ihr kann zum Zwecke der Arretierung die STM-Plattform nach oben gegen einen Anschlag gehoben werden.

Um mit dem STM1 das SAW-STM-Experiment durchführen zu können, wurden die Montage der Proben und die Verkabelung des Rastertunnelmikroskops erweitert. Damit die SAW in der Probe während der Messung angeregt werden kann, müssen im Gegensatz zur konventionellen Rastertunnelmikroskopie mehrere Kontakte zur Probe geschlossen werden. Da andererseits die Probe zwischen der Bedampfungsposition und dem STM frei transferierbar sein muß, war eine feste Verdrahtung wie beim Luft-SAW-STM [92] ausgeschlossen. Stattdessen wurde eine Steckverbindung konstruiert, die mobile Kontaktierung, die die Probe kontaktiert, sobald sie in das STM eingesetzt wird. Dabei mußte berücksichtigt werden, daß der hierfür umgebaute Probenhalter den Bedampfungs Temperaturen bis 500°C standhalten muß. Darüberhinaus bestand die konstruktive Herausforderung, den Mechanismus von fünf Federkontakten und einer Feder zur Arretierung des Probenhalters in einem von der STM-



Bf: Basisflansch
 F123: Flansch mit Durchführungen
 für Koaxialkabel 1, 2, 3
 Kd: Koaxialdurchführungen
 Kk1-Kk5: Koaxialkabel 1-5
 Gs: Gewindestange
 TPK: twisted-pair-Kabel
 Ks: Kontaktstiftbrett
 Pb: Probe
 Ds: Dreibein-Scanner

OPA: Operationsverstärker
 STM-Pf: STM-Plattform
 Kb: Kupferblech der Wirbelstrombremse
 Mg: Magnet der Wirbelstrombremse
 F45: Flansch mit Durchführungen
 für Koaxialkabel 4 und 5
 Jb: Justierblock
 Fd: Flansche für STM-Durchführungen
 Sd: Schiebedurchführung
 Fa: Feder-Aufhängung

Figure 6.6: Das SAW-STM mit der Hochfrequenz-Verkabelung. Das STM ruht auf der STM-Plattform; zur Schwingungsisolierung dient die Federaufhängung der STM-Plattform und die Wirbelstrombremse. Abgebildet ist die eingeplante vollständige Installation von fünf Koaxialkabeln, die von justierbaren Gewindestangen ohne Kontakt zur STM-Plattform gehalten werden. Die Koaxialdurchführungen sind auf zwei CF40-Flansche verteilt.

Konstruktion beschränkten Volumen von $25 \times 9 \times 8 \text{ mm}^3$ zu realisieren. Ein weiteres Ziel bestand darin, das HF-Signal möglichst hoher Frequenz zur Anregung der SAW und zur Modulation der Tunnelspannung in die UHV-Kammer einzuspeisen. Hierzu mußten rausch- und verlustarme HF-Signalwege gelegt werden, bei denen Reflexionen und Abstrahlung durch Impedanzanpassung bzw. Abschirmung zu minimieren waren. Schließlich galt es, Masseschleifen durch elektrische Isolation der Abschirmungen der Koaxialleitungen zu verhindern. Hinsichtlich einer einfachen Demontage des SAW-STM von der UHV-Kammer mußten die HF-Leitungen in dem STM-Basisflansch integriert werden. Zu diesem Zweck wurde ein neuer Basisflansch konstruiert.

6.5.2 Die mobile Kontaktierung der Probe

Abb. 6.7 zeigt die Vorder- und die Rückseite des Probenhalters mit den Modifikationen für die mobile Kontaktierung. Damit er zur Probenaufnahme des STM1 kompatibel ist, gleicht der Probenhalter bis auf seine vergrößerte vertikale Abmessung dem mitgelieferten Probenhalter. Da wegen der erfordernten Hitzebeständigkeit keine Klebstoffe verwendet werden konnten, wurden der Probenchip und die unten erläuterte rückseitige Drathalterung von Stahlfedern gehalten. Diese sind an den Probenhalter punktgeschweißt. Um ein seitliches Verrutschen zu verhindern, sitzen die Probe und die Drathalterung in paßgenauen Ausfräsungen des Probenhalters. Auf der Chipoberfläche ist die Gold-Metallisierung, bestehend aus zwei Interdigitalwandlern und dem ex-situ-Tunnelpad zu erkennen. Zum Anlegen der Tunnelspannung und zum Betrieb der beiden Wandler werden also fünf Kontakte benötigt. Die Gold-Metallisierung wurde in einer externen Bedampfungsanlage präpariert und photolithographisch strukturiert. Hinzu kommt das im UHV mit dem Elektronenstrahlverdampfer präparierte in-situ-Tunnelpad, dessen L-Form durch die Bedampfungsmaske an der Probenhaltertrommel definiert ist.

Die Drathalterung führt fünf Kontaktdrähte aus Gold vom Durchmesser 0.5 mm, die als Kontaktfläche für die unten beschriebenen Kontaktfedern der Probenaufnahme dienen. Als Material wurde Macor verwendet, eine leicht zu bearbeitende UHV-kompatible Keramik, bei der Glimmer in eine Matrix von Glas eingebettet ist. Die Kontaktdrähte liegen vertikal in Rillen und durchlaufen durch horizontale Bohrungen das obere Ende der Drathalterung. Ihre Stirnflächen weisen zur Vorderseite des Probenhalters. Sie dienen als Bondfläche für die Bonddrähte, die die Metallisierung des Probenchips mit den Kontaktdrähten verbinden. Um das Bonden zu ermöglichen, mußten die Stirnflächen der Kontaktdrähte poliert werden. Die in ersten Versuchen verwendeten Aluminiumbonddrähte hielten der Bedampfungstemperatur von 250°C nicht stand; unter dem optischen Mikroskop war offensichtlich, daß eine Diffusion des Aluminiums in die Kontaktdrähte die Bondverbindung auflöst hatte. Die daher verwendeten Bonddrähte aus Gold erwiesen sich dagegen als zuverlässig.

Der stationäre Teil der mobilen Kontaktierung sind die fünf Kontaktfedern, die die Verbindung zwischen den HF-Kabeln des STM und den Kontaktdrähten des Probenhalters herstellen,

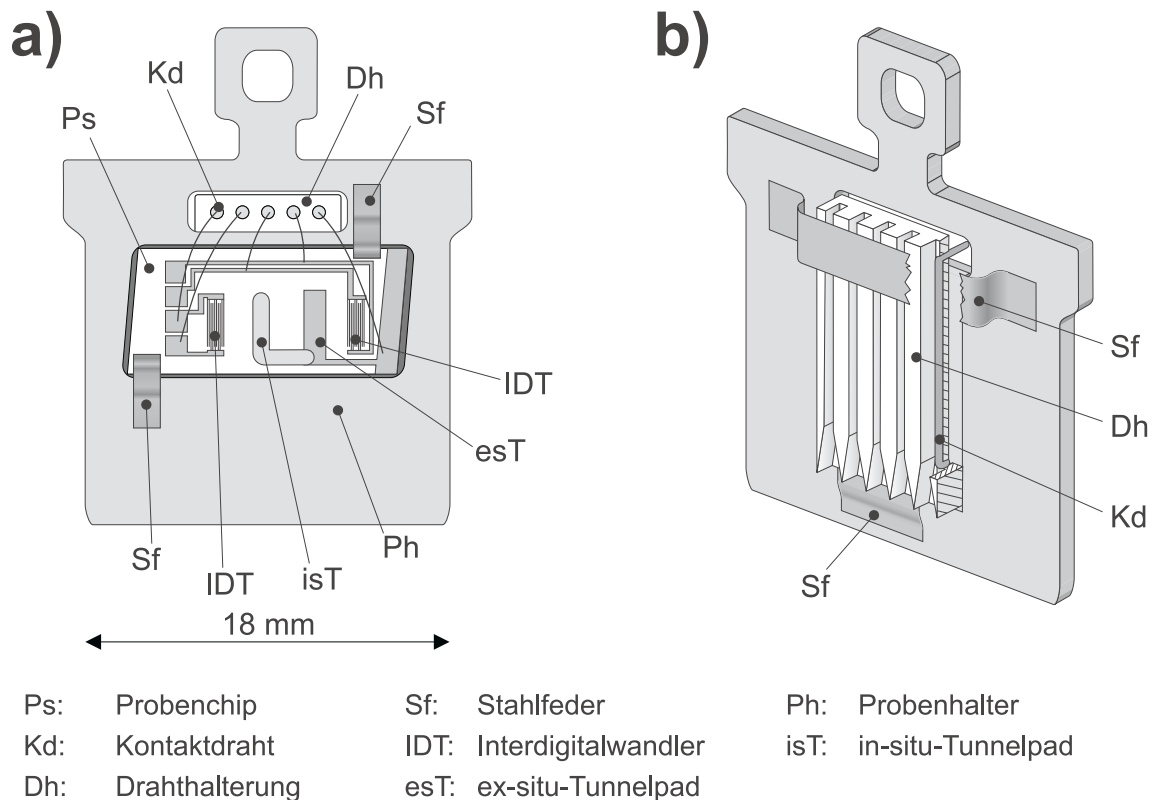


Figure 6.7: Der Probenhalter der mobilen Kontaktierung für das SAW-STM. Der Probenchip ist auf die Vorderseite (a) des Probenhalters geklemmt. Zur Kontaktierung der Probe mit der Hochfrequenz-Verkabelung des SAW-STM dienen die fünf Kontaktdrähte, die in den Rillen der Dragetherung auf der Rückseite (b) des Probenhalters verlaufen und über Bonddrähte mit der Metallisierung der Probe verbunden sind. Die mobile Kontaktierung ermöglicht gleichermaßen die freie Beweglichkeit und den elektrischen Anschluß der Probe im SAW-STM. Schnittflächen sind schraffiert gezeichnet.

sobald der Probenhalter in die Probenaufnahme gesetzt wird. Sie bestehen aus Federstahl des Durchmessers 0.2 mm; erst durch eine Beschichtung der Kontaktpunkte mit Silberlot konnte ein zuverlässiger Kontakt erreicht werden. Die oberen Enden der Kontaktfedern sind an Kontaktstifte gelötet, die ihrerseits in ein Kontaktstiftbrett aus Macor geklebt sind. Die Kontaktstifte dienen als Gegenstück zu den Kontakthülsen an den Enden der weiter unten beschriebenen Twisted-Pair-Kabel¹. Fixiert und voneinander isoliert werden die Kontaktfedern von der Kontaktfederhalterung (Abb. 6.8), einem Ensemble aus Macor und Bornitrid-Bauteilen². Da Gewinde in Keramik-Werkstoffen einem starken Verschleiß unterliegen, sind diese Bauteile mit Ausnahme des Kontaktstiftbrettes in einen Stahlblock verschraubt. Über ihn ist die Kontaktfederhalterung mit dem Schlitten des STM verschraubt, der die gesamte Probenhalterung trägt

¹Zweipoliges Kabel, das aus zwei verdrehten voneinander isolierten Adern besteht.

²Bornitrid ist ein weiterer UHV-tauglicher, leicht bearbeitbarer Isolator. Es ist weniger spröde als Macor und wurde daher für die Herstellung dünner Plättchen verwendet.

und von den Stick-and-Slip-Motoren bewegt wird. Aus Platzgründen mußte die vorgefundene Halterung der Feder, die den Probenhalter in der Probenaufnahme zur Arretierung nach vorne drückt, modifiziert werden. Die Arretierfeder liegt zwischen zwei Bornidrid-Platten, die zwischen dem Schlitten und dem Stahlblock eingeklemmt sind. In die einander zugewandten Seiten der Platten sind Nuten gefräst, die zusammen einen Kanal für die Fixierung der Arretierfeder bilden.

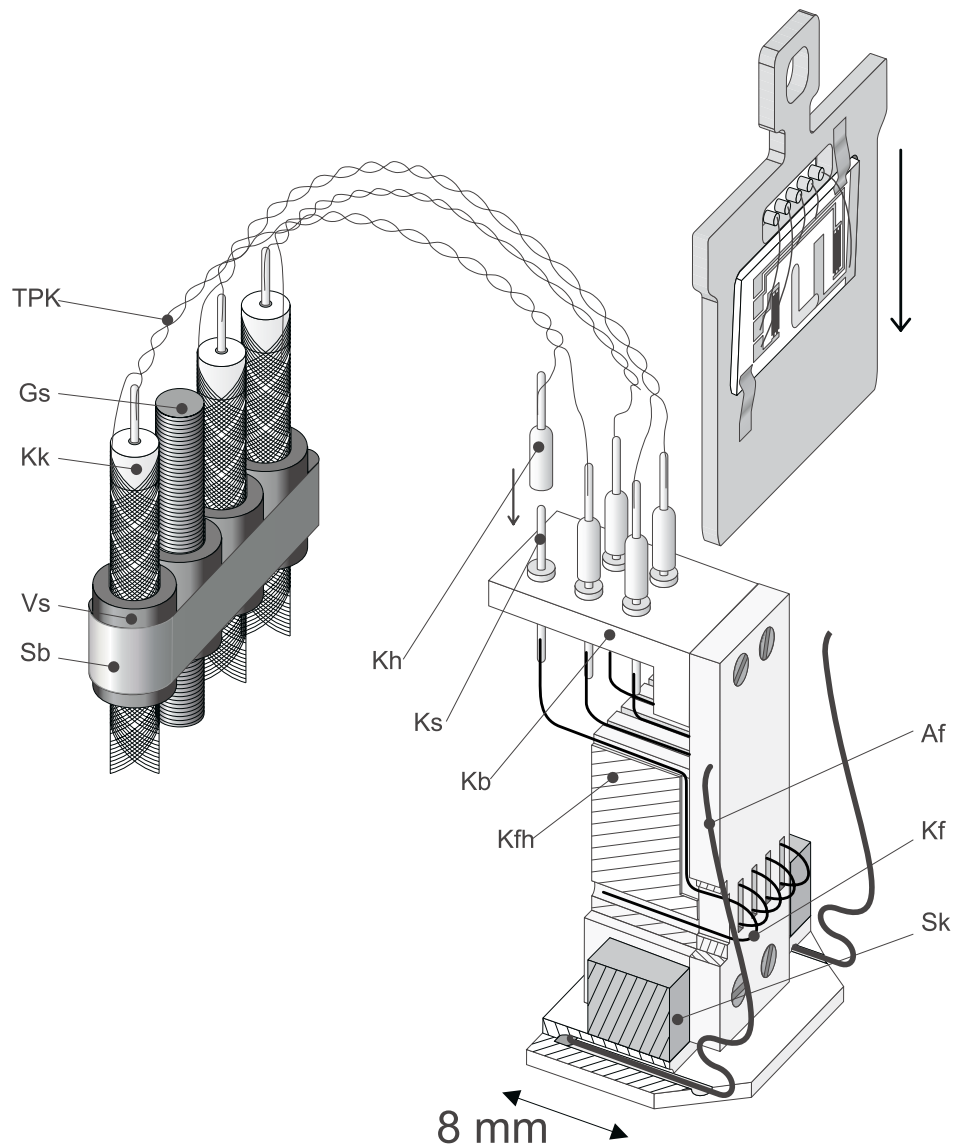
6.5.3 Die Übertragung der Hochfrequenz-Signale

Die Anregung von SAWs und die Modulation der Tunnelspannung im Bereich mehrerer Hundert MHz erfordert die Verwendung von Koaxialkabeln. In ihnen wird das Signal auf dem Innenleiter übertragen. Er ist zylindrisch von einem Dielektrikum und einer leitenden Abschirmung umgeben, die die Einstreuung und die Abstrahlung von Störsignalen unterbindet und bei konstantem Radienverhältnis von Innenleiter und Abschirmung eine über das Kabel konstante Impedanz garantiert. Eine konstante Impedanz der Signalquelle und der Kabel ist erforderlich, um Reflexionen und somit Leistungsverluste und störende Stehwellen zu verhindern. Aus diesem Grunde wurden für die Einspeisung der HF-Signale in die UHV-Anlage Koaxialdurchführungen mit einer konstanten Impedanz und beidseitigen SMA-Buchsen verwendet. Um die in der Rastertunnelmikroskopie weit verbreitete Störquelle der Erdschleifen zu verhindern, mußten zudem die Abschirmungen von den Kammerwänden isoliert geführt werden. Da derartige Koaxialdurchführungen und UHV-taugliche 50-Ohm-Kabel mit SMA-Stecker nicht erhältlich waren, wurden sie von der Firma Ceramasil in unserem Auftrag konstruiert und gefertigt. Die Koaxialkabel haben einen Kupfer-Innenleiter, der von Keramik-Perlen und einer Stahlgeflecht-Abschirmung umgeben ist.

Um die Übertragung von Schwingungen auf die STM-Plattform zu minimieren, mußten zum Anschluß an das STM statt der steifen Koaxialkabel Twisted-Pair-Kabel verwendet werden. Sie bestehen aus einem Paar verdrehter kapton-isolierter Kupferdrähte vom Durchmesser 0.12 mm, bei der eine Ader das Signal und die andere als Abschirmung fungieren. Da das Twisted-Pair-Kabel in der Regel keine konstante Impedanz von 50 Ohm aufweist, wurden hiermit Reflexionen auf der HF-Leitung in Kauf genommen. Dies ist vertretbar, weil ein Impedanzsprung an der Probenkontaktierung ohnehin bestanden hätte. Ferner zeigen die Experimente, daß im ausgetesteten Frequenzbereich bis 400 MHz ausreichende Signalleistungen auch trotz Reflexionen bis zur Probe übertragen werden können. Das eine Ende eines Twisted-Pair-Kabels ist an den Innenleiter bzw. an die Abschirmung eines Koaxialkabels gelötet. An das andere Ende sind Kontakthülsen geklemmt, die auf die Kontaktstifte der Probenaufnahme gesteckt werden.

6.5.4 Die Installation der Hochfrequenz-Leitungen

Abb. 6.6 zeigt die Lage der Hochfrequenz-Leitungen im SAW-STM. Für den Betrieb der beiden Interdigitalwandler der Probe und für die Modulation der Tunnelspannung sind drei



TPK: Twisted-Pair-Kabel

Gs: Gewindestange

Kk: Koaxialkabel

Vs: Viton-Schlauch

Sb: Stahlband

Kh: Kontaktstift

Ks: Kontaktstiftbrett

Kb: Kontaktstiftbrett

Kfh: Kontaktfederhalterung

Af: Arretierfeder

Kf: Kontaktfeder

Sk: Stahlblock

Figure 6.8: Die Probenaufnahme der mobilen Kontaktierung. Die fünf Kontaktfedern stellen über die Twisted-Pair-Kabel die elektrische Verbindung zwischen der Probe und den Koaxialkabeln her. Zur Fixierung drückt die Arretierfeder die Probe gegen einen Anschlag (nicht abgebildet). Die Probe ist in ihrer Position vor dem Einsetzen in die Probenaufnahme gezeichnet. Für den Umbau zum SAW-STM wurde das STM1 um die abgebildete Konstruktion erweitert.

HF-Leitungen nötig (Kk 1, Kk2, Kk3 in Abb. 6.6). Da in zukünftigen Experimenten auch Kreuzstrukturen mit vier senkrecht zueinander stehenden Wandlern betrieben werden sollen, wurde bei den Umbauten zum SAW-STM die Installation zweier zusätzlicher Koaxialkabel eingeplant (Kk4, Kk5). Der umgestaltete Basisflansch trägt daher insgesamt vier CF40-Flansche: zwei für die Durchführungen für den konventionellen STM-Betrieb und jeweils einen für die Durchführungen der drei installierten bzw. für die beiden geplanten Koaxialkabel. Von den Durchführungen verlaufen die Koaxialkabel bis auf die Höhe des Probenhalters, wobei sie durch Ausfräsungen in der STM-Plattform geführt werden. Konstruktiv bedingt sind diese Ausfräsungen knapp bemessen, was eine präzise Halterung der Koaxialkabel erfordert, um einen mechanischen Kontakt zur schwingungs isolierten STM-Plattform auszuschließen. Zu diesem Zweck sind die drei installierten Koaxialkabel mit einem Stahlband und mit keramikisolierten Drähten an einer vertikalen Gewindestange befestigt. Um einen elektrischen Kontakt zwischen den Abschirmungen und der Gewindestange zu verhindern, sind die Kabel durch Vitonschläuche isoliert. Ein Justierblock, über den die Gewindestange mit dem Basisflansch verbunden ist, erlaubt eine genaue Positionierung der Koaxialkabel. Dieselbe Konstruktion ist für die beiden geplanten Koaxialkabel vorgesehen, wobei für jedes Kabel jeweils eine Gewindestange und eine Ausfräsung in der STM-Plattform zur Verfügung stehen. Wegen der begrenzten Biegsamkeit der Koaxialkabel mußten die Flansche mit den Koaxialdurchführungen schräg gestellt werden, um ein Berühren der STM-Plattform zu vermeiden.

7 Experimentelle Resultate

7.1 Die Kalibrierung des Rastertunnelmikroskops

Eines der primären Ziele des SAW-STM-Experimentes ist es, die geometrische Gestalt der Oszillationsellipse durch die Auswertung des Topographie-, des Amplituden und des Phasenbildes zu bestimmen. Allen drei Bildern liegt der laterale Maßstab der horizontalen Bewegung des Scanners zugrunde, der die Strukturlängen in den Raumrichtungen x und y mit der Anzahl der Bildpunkte in den beiden orthogonalen Scanrichtungen verbindet. Analog verknüpft der vertikale Maßstab die Höhe der topographischen Strukturen mit den im Topographiebild als Grauwert dargestellten z -Werten. Maßgeblich ist hierbei die Proportionalität zwischen der Längenänderung des piezoelektrischen Scanners, der die STM-Spitze trägt, und der angelegten Spannungen zur Steuerung der Bewegung in x -, y - und z -Richtung. Da sich Fehler im lateralen und vertikalen Maßstab direkt auf die gemessenen Längen der Oszillationsellipse übertragen, wurde großen Wert darauf gelegt, den Fehler in der Kalibrierung dieser Maßstäbe weitgehend zu minimieren.

Zur Bestimmung des lateralen und des vertikalen Maßstabes werden mit dem STM die für eine Probenstruktur typische Längenabmessungen gemessen und mit Literaturwerten verglichen, die mit anderen Methoden der Strukturaufklärung, etwa Röntgenbeugung oder LEED¹, gewonnen wurden. Üblich ist dabei die Auswertung von Gitterkonstanten der mit dem STM vermessenen Oberflächenrekonstruktion für den lateralen Maßstab sowie die Höhe monoatomarer Stufen für den vertikalen Maßstab.

7.1.1 Die Kalibrierung des lateralen Maßstabes

Ist eine mit dem STM gemessene periodische Oberflächenstruktur gegenüber der aus der Literatur erwarteten Struktur in lateraler Richtung verzerrt, so kann dies an einem nicht kalibrierten lateralen Maßstab liegen oder aber auch Folge der thermischen Drift sein. Wegen dieser während der Messung eines Bildes als konstant angenommenen Relativbewegung zwischen Probe und Spitze liefert ein einfacher Vergleich einer gemessenen Oberflächenstruktur mit der erwarteten keine ausreichend präzise laterale Kalibrierung. Dieses Problem löst ein im Rahmen dieser Arbeit entwickelter Algorithmus, der im Anhang B vorgestellt und zur Kalibrierung angewendet wird.

Es seien die Kalibrierungsfaktoren p_x und p_y das Verhältnis der tatsächlich vom STM abgerasterten Wegstrecken zu den Längen, die die STM-Meßsoftware auf Basis der werkseitigen Kalibrierung angibt. Eine genauere Definition der Kalibrierungsfaktoren wird im Anhang B geliefert. Um den Fehler von p_x und p_y berechnen zu können, wurden mehrere atomar aufgelöste Topographie-Bilder einer Graphit-Oberfläche ausgewertet. Die Ergebnisse dieser Kalibrierung sind in der Tabelle 7.1 zusammengefaßt. Dabei sind $200 \times d_{sx}$ und $200 \times d_{sy}$ die

¹Low Energie Electron Diffraction

p_x	p_y	$200 \times d_{sx} [\text{\AA}]$	$200 \times d_{sy} [\text{\AA}]$
2.00 ± 0.03	1.460 ± 0.015	-0.9 ± 1.9	1.9 ± 1.2

Table 7.1: Kalibrierungsfaktoren und gemessene Drift während einer Messung eines STM-Bildes mit 200 Zeilen. Die Kalibrierungsfaktoren p_x und p_y geben das Verhältnis zwischen exakter und werkseitiger Kalibrierung des STMs an. Die Parameter wurden aus Topographie-Bildern einer Graphit-Oberfläche berechnet, die in unterschiedlichen Scanrichtungen aufgenommen wurden.

Komponenten der Driftlänge während eines Scans mit 200×200 Punkten. Die relativ große Abweichung zwischen p_x und p_y ist durch die Alterung der Piezoaktuatoren des Rastertunnelmikroskops während der Nutzungsdauer von mittlerweile 10 Jahren zu erklären. Zusätzlich kann das Ausheizen des Rastertunnelmikroskops auch bei den empfohlenen Temperaturen unter 180°C einen Einfluß auf das Verhalten der Piezoaktuatoren haben. Der erfreulich geringe Fehler der Kalibrierungsfaktoren von unter 2% geht in den Gesamtfehler des in Abschnitt 7.4.1 experimentell bestimmten Ellipsenwinkels ein. Die Drift während einer Messung beträgt gemäß der Tabelle 7.1 7 \AA bzw. -2 \AA in x- bzw. y-Richtung und ist damit gegenüber der Kantenlänge des STM-Bildes von 50 \AA nicht zu vernachlässigen. Dies zeigt, daß die Berücksichtigung der Drift gestellten Algorithmus zur lateralen Kalibrierung notwendig ist. Die meist angewendete Vorgehensweise, ohne Berücksichtigung der Drift lediglich die Kalibrierungsfaktoren anzupassen, bis das Graphit-Gitter korrekte Abmessungen hat, hätte also zu einem Fehler in der Kalibrierung der STM-Bilder geführt, der die Genauigkeit der Bestimmung des Ellipsenwinkels wesentlich beeinträchtigt hätte.

7.1.2 Die Kalibrierung des vertikalen Maßstabes

Um den vertikalen Maßstab des Rastertunnelmikroskops zu kalibrieren, wurde die im Topographiebild gemessene Höhe auf der Gold(111)-Oberfläche ausgewertet und mit dem Literaturwert für die Stufenhöhe von 2.5 \AA verglichen. Um die nie auszuschließende Verkipfung der Probenoberfläche gegenüber der Scanebene (der Ebene konstanter z-Auslenkung des Scanners) zu korrigieren, wird zuerst von der gemessenen STM-Topographie eine Ebene der Neigung der Terrassen subtrahiert. Als Resultat erscheinen die Terrassen im Topographiebild dann als Ebenen konstanter Höhe, wie am Beispiel der in Abb. 7.1 (a) dargestellten Gold(111)-Oberfläche zu erkennen ist. Am Schnittprofil entlang einer Geraden lassen sich dann die Höhendifferenzen benachbarter Terrassen ausmessen (Abb. 7.1 (b)). Zur Steigerung der Meßgenauigkeit und zur Bestimmung eines statistisch ermittelten Fehlers für den z-Kalibrierungsfaktor wurden Stufenhöhen von STM-Messungen an neun Positionen auf zwei Proben untersucht. Durch den Vergleich von Stufenhöhen an unterschiedlichen Probenpositionen können außerdem monoatomare Stufen von Stufen mehrerer Atomlagen unterschieden werden: Der kleinste gemeinsame Teiler aller gemessenen Stufenhöhe ist die Höhe einer monoatomaren Stufe. Die Proben bestehen aus Glimmersubstraten, auf die ein 60 \AA dicker Goldfilm abgeschieden wurde.

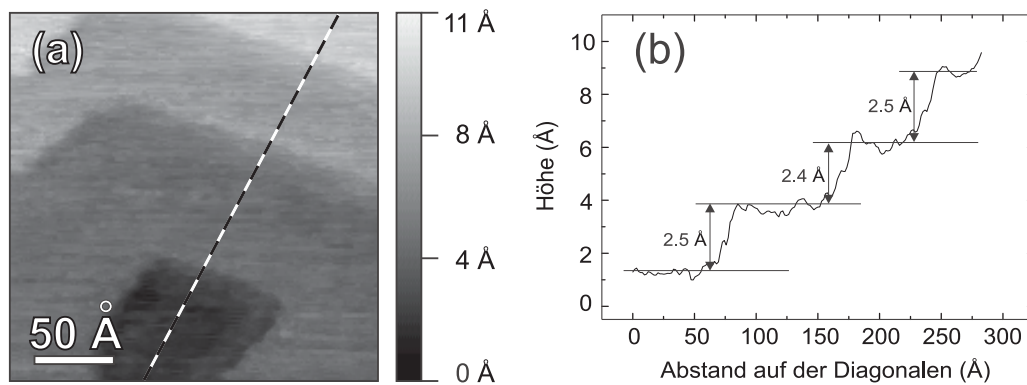


Figure 7.1: Die Kalibrierung des vertikalen Maßstabes an den monoatomaren Stufen einer Gold(111)-Oberfläche. (a) STM-Topographie der Terrassenstruktur nach der Korrektur der Verkippung zwischen Probenoberfläche und Scanebene. Im Höhenprofil (b) entlang der gestrichelten Diagonale in (a) lassen sich die Höhen zwischen den Terrassen ablesen.

Der Quotient aus mittlerer gemessener Höhe der monoatomaren Stufen und dem Literaturwert von 2.5 Å beträgt 2.01 ± 0.04 . Um diesen Faktor wurde der z-Maßstab der Standardkalibrierung korrigiert, um zur exakten vertikalen Kalibrierung des STM zu gelangen. Der relative Fehler dieser Messung von 2% ist somit der Fehler des z-Maßstabes der Topographie-Bilder, der gleichzeitig auch in den Fehler bei der Bestimmung des Ellipsenwinkels (Abschnitt 7.4.1) eingeht.

7.2 Die Leistungsmerkmale des UHV-SAW-STM

Beim Umbau des konventionellen Rastertunnelmikroskop zum SAW-STM mußten zwei technische Aspekte berücksichtigt werden: Wie im Kapitel 6 beschrieben, wurde das SAW-STM für den Einsatz im UHV entwickelt: Es erlaubt die Probenpräparation unter UHV-Bedingungen, einen von elektrischen Leitungen ungehinderten Probentransfer und die automatische Kontaktierung im STM. So können Proben trotz der Notwendigkeit, fünf elektrische Kontakte zum STM herzustellen, ohne Kontakt zur Luft untersucht werden. Außerdem stellt das experimentelle Vorhaben, möglichst hochfrequente Wellen zu untersuchen, besondere Anforderungen an die Konstruktion der elektrischen Leitungen und Kontakte. Diesem zweiten technischen Aspekt wurde durch die Verwendung UHV-tauglicher Koaxialdurchführungen und Koaxialkabel mit konstanter Impedanz Rechnung getragen. In diesem Abschnitt soll nun diskutiert werden, inwieweit das UHV-SAW-STM unter dem Gesichtspunkt der Hochfrequenztechnik die gestellten Anforderungen erfüllt. Es werden der Frequenzgang, die Bandbreite und die Dynamik untersucht. Hiermit werden zwei Fragen beantwortet: Bei welchen Frequenzen können im SAW-STM akustische Oberflächenwellen angeregt und detektiert werden, und welche ist die kleinste Wellenamplitude, die ein erkennbares Meßsignal liefert?

Wie im Abschnitt 6.4.3 erläutert, erzeugt der als Probe verwendete Frequenzfilter Rayleighwellen bei der Grundfrequenz $f_{SAW, fund} = 40$ MHz, bei der dritten Harmonischen $f_{SAW, 3harm} = 120$ MHz und bei der neunten Harmonischen $f_{SAW, 9harm} = 360$ MHz. Weitere höhere Harmonische werden von dieser Probe nur mit nicht meßbarer Amplitude angeregt. Bei den hier vorzustellenden Meßreihen wurde in 50 kHz-Schritten die Frequenz des f_{SAW} des IDT-HF-Signals, das zur Erzeugung der SAW an den Sender-IDT angelegt wird, variiert. An einer festen Spitzenposition wurde gleichzeitig die Amplitude A des SAW-STM-Signals aufgezeichnet, wobei die Tunnelspannung den Mittelwert $V_0 = 25$ mV und die Modulationsamplitude $V_1 = 40$ mV hatte. Um die Amplitude des SAW-STM-Signals mit der Amplitude der longitudinalen und der transversalen Verschiebungskomponente u_1 bzw. u_3 vergleichen zu können, wurde mit dem Netzwerkanalysator HP 8753C auch die Transmission S_{12} als Funktion der Frequenz f_{SAW} gemessen. S_{12} ist das Verhältnis aus der Amplitude der Wechselspannung, die die SAW im Empfänger-IDT erzeugt, und der Amplitude V_{SAW} des IDT-HF-Signals. Bis auf den in Abschnitt 7.2.1 erklärten Einfluß des Triple-Transit-Signals ist $S_{12}(f_{SAW})$ zu den Amplituden u_1 und u_3 der SAW proportional.

7.2.1 Der Einfluß von Reflexionen auf das SAW-STM-Signal

Die Abbildung 7.2 zeigt den Frequenzgang der Amplitude und der Transmission S_{12} im Bereich der Grundfrequenz $f_{SAW, fund} = 40$ MHz. Bei der Messung der Amplitude betrug der mittlere Tunnelstrom I_0 3.4 nA, die SAW wurde mit einem IDT-HF-Signal der Amplitude $V_{SAW} = 200$ mV angeregt. Um das Signal-Rausch-Verhältnis zu verbessern, wurden die Meßwerte von 65 Frequenzrampen gemittelt, wobei auch eine geringere Anzahl genügt hätte, um

die Feinstruktur der $A(f_{\text{SAW}})$ -Kurve sich herausbilden zu lassen. Diese Feinstruktur ist nicht willkürlich durch das Rauschen bestimmt; denn sie ließ sich in einer Vergleichsmessung reproduzieren. Sowohl die Amplitude als auch die Transmission lassen symmetrisch zur Grundfrequenz das Paßband des Frequenzfilters (35-45 MHz) und die beiden Seitenbänder (31-34 MHz bzw. 46-50 MHz) erkennen. Die erkennbare grobe Übereinstimmung des Frequenzgangs von A und S_{12} stellt einen wichtigen Baustein in der experimentellen Untermauerung der Theorie des SAW-STM-Signals dar: Sie ist deutliches Indiz dafür, daß das Differenzfrequenz-Signal durch den Einfluß der akustischen Oberflächenwelle auf den Tunnelübergang hervorgerufen wird. Differenzfrequenz-Anteile des Tunnelstromes, die auf andere Mechanismen zurückzuführen sind, würden nicht den Frequenzgang des Wandlers widerspiegeln: Diese sind das in der Einleitung des Abschnittes 7.3 erwähnte Mischen an nicht mit dem Tunnelübergang verbundenen Inhomogenitäten oder die Differenzfrequenz-Komponente des Rauschspektrums des Tunnelstromes.

Die Feinstruktur der $S_{12}(f_{\text{SAW}})$ - und der $A(f_{\text{SAW}})$ -Kurven in der Abbildung 7.2 stimmen jedoch nicht überein. Eine Erklärung für diese Diskrepanz wurde im Rahmen dieser Arbeit entwickelt. Sie beruht auf der Tatsache, daß der Frequenzgang der Amplitude und der Transmission von partiell an den Wandlern reflektierten SAWs beeinflußt wird. In der Abbildung 7.3

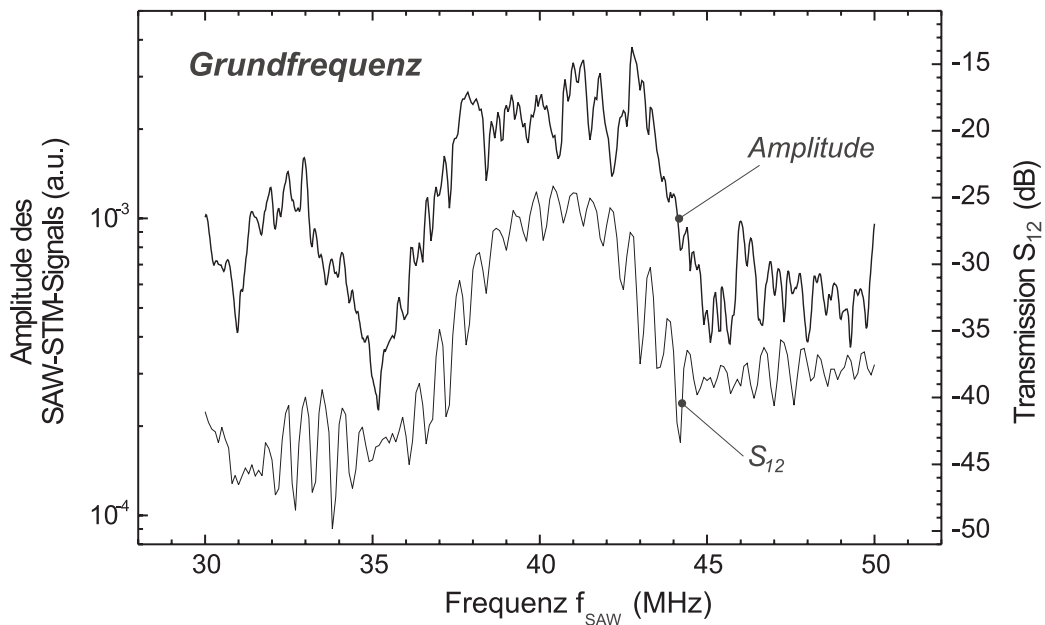


Figure 7.2: Frequenzgang der Amplitude des SAW-STM-Signals und des Frequenzfilters. Die Haupt- und Nebenbänder der Transmission des als Probenchip verwendeten Frequenzfilters bestimmen die grobe Struktur des Frequenzgangs der Amplitude. Dies beweist, daß das gemessene SAW-STM-Signal von der SAW-bedingten Abstandsmodulation bestimmt wird und andere, nicht mit der Modulation des Tunnelabstandes verknüpfte Frequenzkomponenten vernachlässigbar klein sind. Der Unterschied in der Feinstruktur beider Kurven ist, wie im Text erläutert, auf den Einfluß der partiell an den Wandlern reflektierten Wellen zurückzuführen.

sind die zwischen dem Sender-IDT und dem Empfänger-IDT propagierenden Wellen sowie das resultierende Wellenfeld schematisch dargestellt. Zur Vereinfachung ist nur die Transversalkomponente der Welle berücksichtigt. Ohne Reflexion (Abb. 7.3 (a)) bewegt sich nur die Welle SAW 1 zum Empfänger-IDT. Unter Vernachlässigung der ohnehin geringen Dämpfung der Welle, ist die Amplitude der Welle und damit auch die Amplitude des SAW-STM-Signals über die Laufstrecke konstant. Der eingezeichnete Unterschied zwischen der Wellenamplitude bei den Frequenzen $f_{SAW,1}$ und $f_{SAW,2}$ resultiert aus dem Frequenzgang des Empfänger-IDTs. Auch durch die Verwendung eines Split-Finger-Designs (Abschnitt 3.1) sind partiell reflektierte Wellen jedoch nicht vollständig zu vermeiden. In der Abbildung 7.3 (b) sind die primäre Welle SAW 1 und die durch einfache bzw. zweifache Reflexion an den Wandlern erzeugten Wellen SAW 2 bzw. SAW 3 eingezeichnet. Reflektierte Wellen höherer Ordnung können wegen ihrer geringen Amplitude in dieser Argumentation ignoriert werden. Da die SAW 2 der SAW 1 und der SAW 3 entgegenläuft, ergibt sich ein Wellenfeld, dessen Amplitude² $u_{\Sigma,3}$ ortsabhängig ist. Wird die Frequenz der Wellen nun geringfügig verändert, dann ändert sich die Phasenlage von SAW 1, SAW 2 und SAW 3 und damit auch die Lage der Maxima und Minima des resultierenden Wellenfeldes. Folglich ändert sich die Amplitude der Abstandsmodulation, die das SAW-STM am festen Ort der Spitze mißt, bei einer kleinen Änderung von f_{SAW} . Dieser Effekt erzeugt die Feinstruktur der $A(f_{SAW})$ -Kurve, während ihre grobe Struktur von der Frequenzabhängigkeit der Abstrahlcharakteristik des Sender-IDTs bestimmt wird.

Die Feinstruktur des Frequenzganges der Transmission hingegen wird vom Triple-Transit-Signal verursacht, also vom Primärsignal, das die zweifach reflektierte SAW 3 im Empfänger-IDT verursacht. Dieses addiert sich zu dem Signal, das die primäre SAW 1 erzeugt. Da die Phasenlage des Triple-Transit-Signals gegenüber dem Primärsignal von der Frequenz der akustischen Oberflächenwellen abhängt, ist auch das am Empfänger-IDT erzeugte Gesamtsignal, das der Netzwerkanalysator mißt, frequenzabhängig. Anders als bei der Entstehung des Wellenfeldes, dessen Amplitude das SAW-STM-Signal bestimmt, spielt hierbei die einfach reflektierte SAW 1 keine Rolle. Daher unterscheiden sich die Frequenzgänge der Transmission und der Amplitude des SAW-STM-Signals in ihrer Feinstruktur.

Um zu untersuchen, wie effizient die Einspeisung des IDT-HF-Signals in das UHV-SAW-STM ist, wurde zum Vergleich die Transmission auch am Spitzenmeßplatz gemessen. Dort können durch eine Kalibrierung die Verluste bis zu den Kontaktnadeln rechnerisch eliminiert werden, so daß nur die Charakteristik des Frequenzfilters in die Messung eingeht. Verglichen mit der am Spitzenmeßplatz gemessenen Transmission war die Transmission im UHV-SAW-STM um 1 dB, also um 10% geringer. Bei der Grundfrequenz $f_{SAW, fund} = 40$ MHz beeinträchtigt die UHV-kompatible Verkabelung des SAW-STM die Wellenanregung also nur unwesentlich.

²Der Index Sigma weist darauf hin, daß sich das Wellenfeld aus der Summation der einzelnen propagierenden Wellen ergibt.

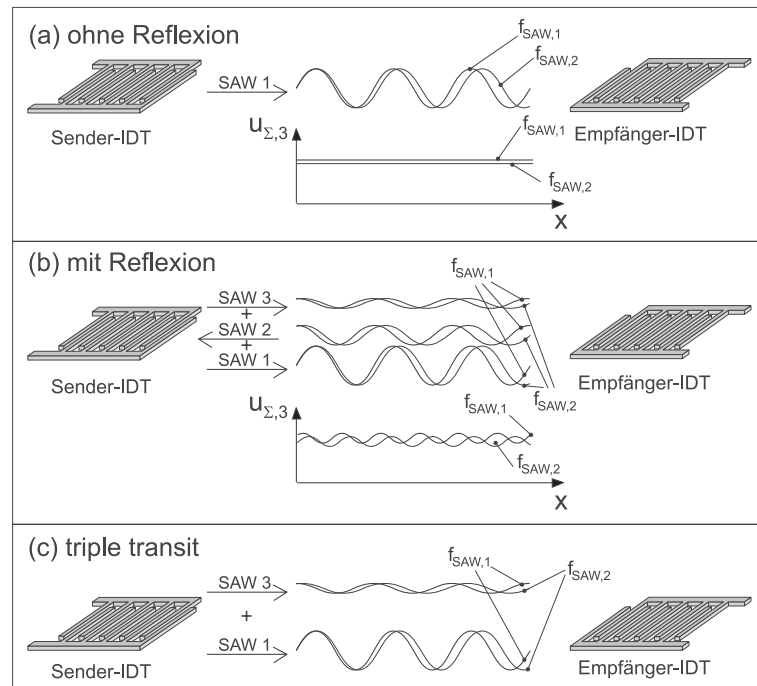


Figure 7.3: Erklärung der Feinstruktur im Frequenzgang der Amplitude und der Transmission. (a) Ohne Reflexion an den Interdigitalwandlern ist die Auslenkung $u_{\Sigma,3}$ unter Vernachlässigung der Dämpfung auf der Laufstrecke zwischen den Wandlern konstant. (b) Unter Berücksichtigung der partiell reflektierter Wellen SAW 2 und SAW 3 besteht auf der Laufstrecke ein Wellenfeld; die Wellenamplitude, die die Amplitude des SAW-STM-Signals bestimmt, ist orts- und frequenzabhängig. (c) Für das vom Empfänger-IDT detektierte Signal, also für die Transmission, ist jedoch nur die Summe der Wellen SAW 1 und SAW 3 verantwortlich; es resultiert eine vom Fall (b) abweichende Frequenzabhängigkeit.

7.2.2 Die Dynamik des UHV-SAW-STM

Das Ziel der nun vorzustellenden Meßreihe ist, zu untersuchen wie klein die Amplitude der schwächsten akustischen Oberflächenwelle sein darf, damit das UHV-SAW-STM diese Welle noch detektieren kann. Zu diesem Zweck wurde der Frequenzgang der Amplitude und der Transmission in der Umgebung der dritten Harmonischen $f_{SAW,3harm} = 120$ MHz (100-140 MHz) gemessen. Dies geschah für unterschiedliche Werte der Amplitude des IDT-HF-Signals $V_{SAW} = 1$ mV, 10 mV, 100 mV und 1000, wobei zur Verbesserung des Signal-Rausch-Verhältnisses für jede Spannung V_{SAW} die Daten von jeweils vier Frequenzrampen gemittelt wurden. Der mittlere Tunnelstrom I_0 betrug 10 nA.

Die Abbildung 7.4 zeigt den gemessenen Frequenzgang der Amplitude und der Transmission. Deutlich ist sowohl bei S_{12} als auch bei der Amplitude für alle untersuchten V_{SAW} -Werte das Paßband zu erkennen. Wie schon bei der Grundfrequenz zeigen die Kurven in ihrer groben Struktur eine deutliche Ähnlichkeit. Die Unterschiede in ihrer Feinstruktur sind auf die für die Grundfrequenz beschriebenen Interferenz-Mechanismen zurückzuführen. Im Abschnitt 7.3.1 wurde hergeleitet, wie die Amplitude des IDT-HF-Signals in die Amplitude der Abstandsmodulation umgerechnet werden kann. Diese Kalibrierung wurde für die SAW bei der Grundfre-

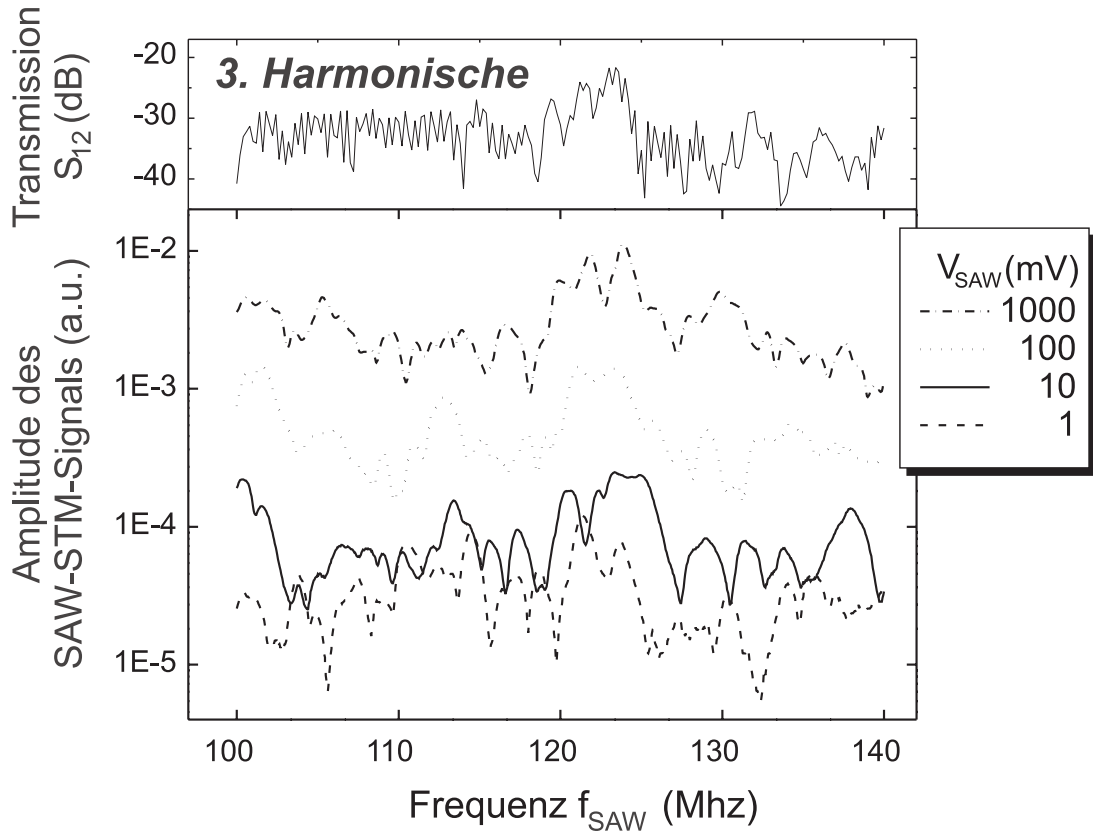


Figure 7.4: Der Frequenzgang der Amplitude des SAW-STM-Signals und der Transmission bei der dritten Harmonischen. Die Wellenamplitude wurde durch Regelung des HF-IDT-Signals, das am Interdigitalwandler die SAW erzeugt, über drei Größenordnungen variiert. Somit gelang es, mit dem UHV-SAW-STM akustische Oberflächen nachzuweisen, deren Amplitude in der Größenordnung 0.001 \AA liegt.

quenz durchgeführt. Da bekanntermaßen die Wellenanregung eines Wandlers bei höheren Harmonischen weniger effizient als bei der Grundfrequenz ist, kann diese Kalibrierung nur obere Grenzen für die tatsächlichen Amplituden der Abstandsmodulation bei der dritten Harmonischen liefern. Diese oberen Grenzen betragen also den V_{SAW} -Werten entsprechend 1.2 \AA , 0.12 \AA , 0.012 \AA und 0.0012 \AA . Mit dem UHV-SAW-STM können also im Frequenzbereich der dritten Harmonischen $f_{SAW,3harm} = 120 \text{ MHz}$ SAWs mit Amplituden angeregt und detektiert werden, deren Amplitude kleiner als 0.0012 \AA ist. Dies entspricht einer Dynamik von drei Größenordnungen. Der dynamische Bereich ist nach unten hin vom Signal-Rausch-Verhältnis begrenzt; bei noch schwächeren Wellen ein SAW-STM-Signal zu erzielen, gelang nicht. Die obere Grenze des dynamischen Bereiches ist durch die thermische Beschädigung des Wandlers bei zu hohen Strömen bestimmt. Eine analoge Messung bei der Grundfrequenz zeigte, daß hier ebenfalls SAWs einer Amplitude bis hinab zu 0.0012 \AA mit dem SAW-STM detektiert werden können.

Diese hohe Dynamik liegt nicht bei Messung von SAW-STM-Bildern vor, weil hier wegen der Drift keine mehrfache Mittelung von Meßwerten der Amplitude und der Phase möglich ist. Die

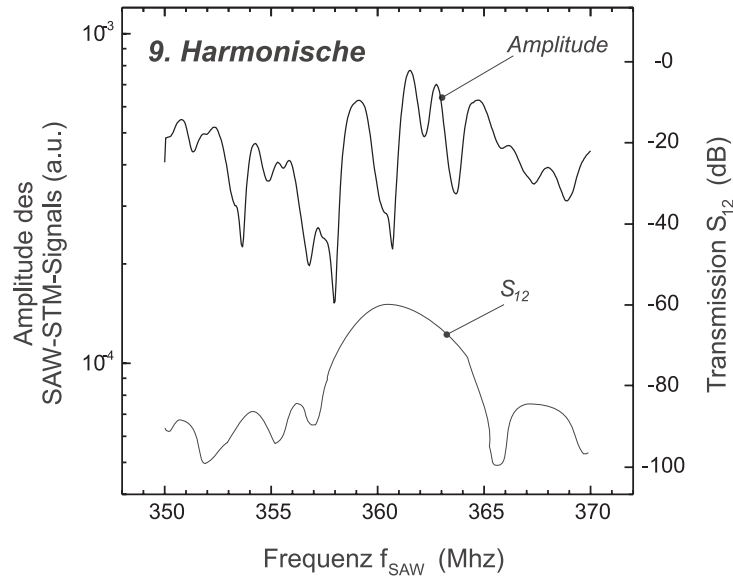


Figure 7.5: Detektion akustischer Oberflächenwellen der Frequenz 360 MHz. Im Frequenzgang der Transmission bei der neunten Harmonischen ist das Paßband deutlich zu erkennen. Im Frequenzbereich des Paßbandes, in dem der Interdigitalwandler SAWs erzeugen kann, tritt die Amplitude des SAW-STM-Signals aus dem Rauschuntergrund heraus.

Detektion akustischer Oberflächenwellen einer Amplitude von 0.001 \AA mit dem UHV-SAW-STM ist dennoch ein unerwartetes, erfreuliches Ergebnis. Dies belegt die Leistungsfähigkeit des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten SAW-STMs.

7.2.3 Die Bandbreite des UHV-SAW-STM

Ein noch weit entferntes aber doch angestrebtes Ziel der Verwendung des SAW-STMs ist die Abbildung elastischer Inhomogenitäten; ein lokal verändertes elastisches Verhalten der Probe hat einen Einfluß auf die Exzentrizität der Oszillationellipse und können somit über die in Abschnitt 7.4.1 beschriebene lokale Messung des Ellipsenwinkels β sichtbar gemacht werden. Die Auflösung, mit der diese elastischen Inhomogenitäten abgebildet werden können, ist dabei von der Wellenlänge der SAW begrenzt. Daher wird bei zukünftigen Messungen das Ziel im Vordergrund stehen, das SAW-STM-Experiment bei möglichst hohen Frequenzen durchzuführen. Von besonderem Interesse ist also die Bandbreite des UHV-SAW-STM, für die in der nun vorzustellenden Messung eine untere Grenze hergeleitet werden soll.

Wie oben erläutert ist die neunte Harmonische bei $f_{\text{SAW},9\text{harm}} = 360 \text{ MHz}$ mit $\lambda_{\text{SAW},9\text{harm}} = 9.7 \mu\text{m}$ die kurzwelligste SAW, die mit der verwendeten Probe angeregt werden kann. Da sie gleichzeitig die schwächste Welle ist, wurde zu ihrer Detektion ein hoher mittlerer Tunnelstrom

von $I_0 = 10$ nA gewählt³ und die SAW-erzeugende Spannung V_{SAW} auf ihren Maximalwert 1000 mV gesetzt. Zur Messung des Frequenzgangs der Amplitude wurden die Amplituden von 10 Frequenzrampen von 350 bis 370 MHz gemittelt. Das Paßband der Amplitude tritt aus dem Rauschuntergrund heraus; es fällt erkennbar mit dem Paßband der Transmission S_{12} zusammen. Hiermit ist gezeigt worden, daß mit dem UHV-SAW-STM akustische Oberflächenwellen bis zu einer Frequenz von 360 MHz erzeugt und detektiert werden können. Daß das Paßband im Frequenzgang der Amplitude so schwach ausgeprägt ist, ist nicht auf den Frequenzgang des UHV-SAW-STM zurückzuführen. Vielmehr liegt der Grund in der geringen Amplitude der neunten Harmonischen; das Maximum der Transmission liegt bei -80 dB, also um mehr als zwei Größenordnungen niedriger als bei den SAWs der Grundfrequenz und der dritten Harmonischen. Um die neunte Harmonische im Frequenzgang von S_{12} überhaupt sichtbar zu machen, mußte die Funktion des Zeitfensters (engl. gate) des Netzwerkanalysators angewendet werden. Sie nutzt aus, daß die bei der Messung von S_{12} vom Sender-IDT erzeugten SAW-Wellenzüge zeitlich später ein elektrisches Signal erzeugen als die elektromagnetische Welle. So kann über ein Zeitfenster das unerwünschte Übersprechsignal, das kapazitiv zum Empfänger-IDT übertragen wird, vom SAW-STM-Signal getrennt werden.

Um die Eignung des UHV-SAW-STM bei noch höheren Frequenzen zu untersuchen, müßten in zukünftigen Experimenten höherfrequente SAW-Filter als Probe verwendet werden. Reflexionen des IDT-HF-Signals an Impedanzsprüngen in der Verkabelung begrenzen die Bandbreite des UHV-SAW-STM: Im Gegensatz zu den Koaxialkabeln und Koaxialdurchführungen weisen die aus Gründen der Schwingungsisolation verwendeten Twisted-Pair-Kabel keine definierte konstante Impedanz auf (vergleiche Abschnitt 6.5.3). Die Leitungen der mobilen Kontaktierung bis hin zu den Bond-Drähten konnten mit vertretbarem konstruktiven Aufwand gar nur unabgeschirmt geführt werden. Die an diesen Impedanzstufen auftretenden Reflexionen bilden auf den Leitungen Stehwellenfelder. Liegt der Sender-IDT auf einem Knoten dieses Stehwellenfeldes, ist die Wellenanregung deutlich beeinträchtigt. Solange jedoch die Wellenlänge des IDT-HF-Signals länger als die zweifache Gesamtlänge der Kabel nicht-konstanter Impedanz sind, können sich keine Knoten im Stehwellenfeld bilden, und die Reflexion stört nicht wesentlich die Wellenanregung. Rechnet man mit einer Länge der Kabel nicht-konstanter Impedanz von 20 cm ergibt sich hieraus eine Frequenz f_{SAW} von 1 GHz, ab der die Effizienz der Wellenanregung vermindert ist. Bei höheren SAW-Frequenzen sind Interferenz-Effekte auf den Kabeln zu erwarten, die bei bestimmten Frequenzen die Wellenanregung erschweren, den Betrieb des UHV-SAW-STM aber nicht unmöglich machen. Eine experimentelle Überprüfung dieser Vorhersage mit im GHz-Bereich arbeitenden Frequenzfiltern sollte angedacht werden.

³ Wie im Abschnitt 4.2.3 hergeleitet, steigt die Amplitude des SAW-STM-Signals fast linear mit I_0 .

7.3 Das SAW-STM-Signal im Constant-Current-Modus — Experimentelle Überprüfung

In diesem Abschnitt werden mehrere Aussagen der in Abschnitt 4.2.3 hergeleiteten Theorie des SAW-STM-Signals im Constant-Current-Modus anhand experimenteller Messungen überprüft. Dieser Vergleich ist durch folgende Gründe motiviert: Die Theorie über das SAW-STM-Signal ist die Grundlage für die Auswertung der im Kapitel 7.4 vorgestellten SAW-STM-Bilder, die zur Bestimmung des Achsenverhältnisses der Oszillationsellipse führt. Läßt sich die Theorie experimentell bestätigen, ist sichergestellt, daß die Annahmen dieser Theorie sowie die aus ihnen gezogenen Schlüsse die physikalische Realität beschreiben. Zusätzlich ist eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten ein Indiz dafür, daß das ausgewertete Differenzfrequenz-Signal überhaupt ein SAW-STM-Signal ist. So muß ausgeschlossen werden, daß Differenzfrequenzsignale als Meßsignal interpretiert werden, die nicht auf die in Abschnitt 4.2.2 beschriebene Mischung der Abstandsmodulation und der Tunnelspannungsmodulation an der nicht-linearen Tunnelkennlinie zurückgehen. Diese könnten durch Mischung der HF-Signale, die die SAW anregen bzw. die Tunnelspannung modulieren, an fehlerhaften, nicht-linearen elektrischen Kontakten oder an Nichtlinearitäten in der Meßelektronik entstehen.

7.3.1 Die Absolutkalibrierung der Amplitude der Abstandsmodulation

Der zuerst durchzuführende Vergleich der theoretisch erwarteten Abhängigkeit $A(d_1)$ der Amplitude von der Amplitude d_1 der Abstandsmodulation mit der gemessenen Abhängigkeit liefert ein zentrales Ergebnis dieser Arbeit: Es gelingt, durch Anfitten der gemessenen Daten an die theoretischen Kurven die Abstandsmodulation in Angstrom kalibriert auszumessen.

Bei der hier auszuwertenden Meßreihe wurde abgesehen von der unvermeidlichen Drift die Spitze an einer festen Probenposition gehalten und das SAW-STM im Constant-Current-Modus betrieben. Bei konstantem Soll-Tunnelstrom I_0 , konstanter mittlerer Tunnelspannung V_0 und Tunnelspannungsmodulation V_1 wurde die Amplitude A des SAW-STM-Signals als Funktion der Amplitude d_1 der Abstandsmodulation gemessen. Zu diesem Zweck wurde die Amplitude des sogenannten IDT-HF-Signals, also der Wechselspannung die am Interdigitalwandler die SAW anregt, im Bereich 0 mV bis 900 mV verändert. Diese Messung wurde für die Werte des Soll-Tunnelstroms $I_0 = 0.5$ nA, 1 nA, 2 nA und 5 nA und für die Kombinationen $V_1/V_0 = 50$ mV/20 mV, 100 mV/40 mV, 200 mV/80 mV, 300 mV/120 mV, 400 mV/160 mV, 800 mV/320 mV, 2000 mV/800 mV durchgeführt. Um die Meßgenauigkeit zu erhöhen, wurden für jeden Parameter I_0 , V_0 und V_1 vier $A(d_1)$ -Kurven gemittelt. Der Wandler wurde auf seiner ersten Harmonischen bei der Frequenz $f_{SAW} = 39.87$ MHz betrieben, bei der die maximale Amplitude gemessen wurde. Es ist eine bekannte Eigenschaft des Interdigitalwandlers, daß die Amplituden u_1 , u_2 und u_3 der akustischen Oberflächenwelle proportional zur Amplitude des IDT-HF-Signals sind. Somit ist auch die bei fester Position der Spitze in Angstrom

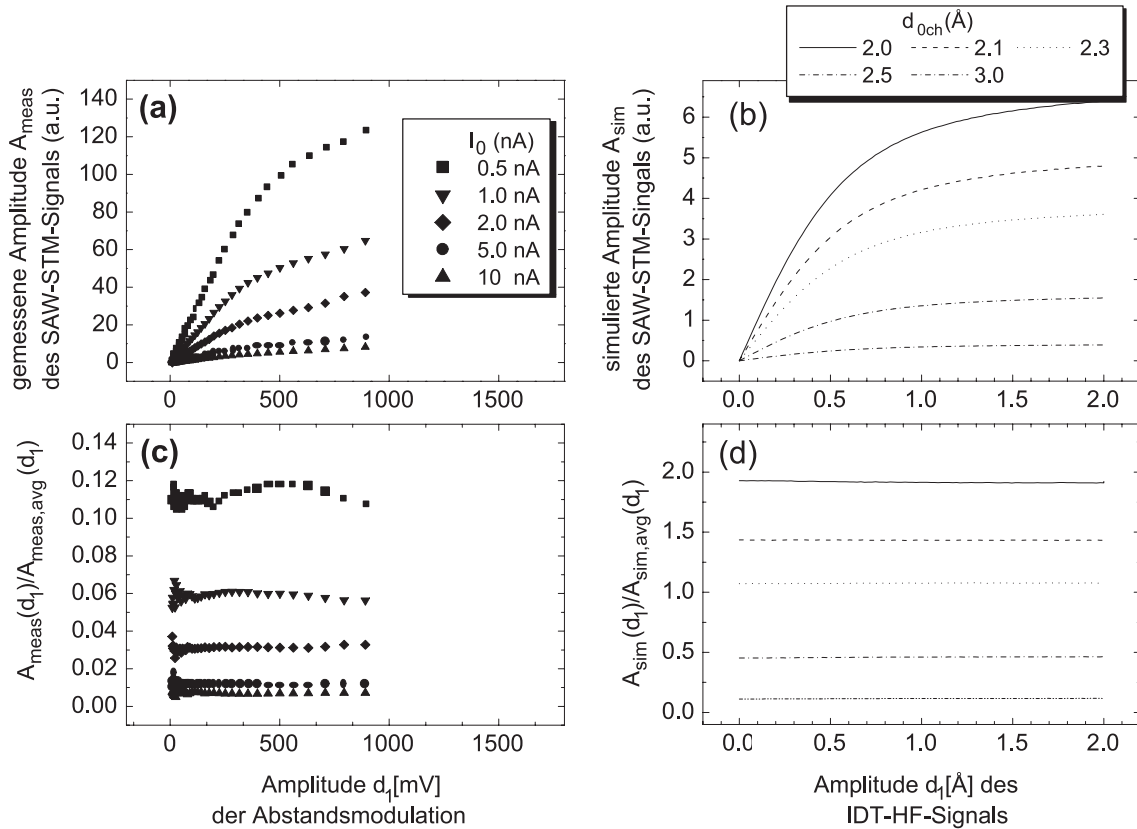


Figure 7.6: Die Abhängigkeit der Amplitude des SAW-STM-Signals von der Amplitude der Abstandsmodulation. Die bei $V_0 = 80$ mV, $V_1 = 200$ mV und verschiedenen Soll-Tunnelströmen I_0 gemessenen Kurven (a) weisen wie die simulierten Kurven (b) einen linearen Anstieg bei schwacher und eine Rechtskrümmung bei stärkerer Abstandsmodulation auf. Die Simulation wurde für unterschiedliche äquivalente Tunnelabstände d_{0ch} durchgeführt. In (c) und (d) wurden die Kurven durch die im Text definierte mittlere Kurve geteilt. Daß sich hierbei für die Messung und die Simulation Horizontalen ergeben, rechtfertigt die Verwendung der Separationsnäherung.

bemessene Amplitude d_1 [Å] der Abstandsmodulation proportional zur Amplitude des IDT-HF-Signals. Letztere wird daher im folgenden mit d_1 [mV] bezeichnet, wobei gilt:

$$d_1[\text{Å}] = q d_1[\text{mV}] \quad (7.1)$$

Ziel ist es nun, aus den Messungen den Proportionalitätsfaktor q zu bestimmen, mit dem, wenn bekannt, aus der am Funktionsgenerator eingestellten Amplitude des IDT-HF-Signals die Amplitude der Abstandsmodulation kalibriert berechnet werden kann. Das Ergebnis der Meßreihe für $V_1 = 200$ mV und $V_0 = 80$ mV ist in der Abbildung 7.6 (a) und (b) der simulierten d_1 -Abhängigkeit der Amplitude gegenübergestellt. Der Vergleich dieser beiden Plots $A_{\text{sim}}(d_1[\text{Å}])$ und $A_{\text{meas}}(d_1[\text{mV}])$ wird dadurch erschwert, daß der Proportionalitätsfaktor q und der Proportionalitätsfaktor $s = A_{\text{sim}}/A_{\text{meas}}$ zwischen den Amplitudenmaßstäben unbekannt sind. Das Problem, daß der Zusammenhang zwischen dem im Experiment gewählten Tunnelstrom I_0 und dem äquivalenten Tunnelabstand d_{0ch} der Simulation nicht bekannt ist, kann unter Ver-

wendung der im Abschnitt 4.2.3 eingeführten Separationsnäherung gelöst werden. Sie besagt, daß sich für äquivalente Tunnelabstände $d_{0ch} > 2 \text{ \AA}$ die gemessenen Amplitude in der Form

$$A_{meas}(d_{0cc}(d_{0ch}(I_0, V_0), d_1[\text{\AA}]), d_1[\text{\AA}], V_1) = V_1 B_{meas}(d_{0ch}(I_0, V_0)) D_{meas}(d_1[\text{\AA}]) \quad (7.2)$$

darstellen läßt. Die Vorgehensweise besteht nun darin, nicht die in der Abbildung 7.6 (a) und (b) dargestellten Daten direkt zu vergleichen, sondern aus den gemessenen und den simulierten Daten jeweils eine Abstandsmodulationsfunktion $D_{meas}(d_1[\text{\AA}])$ und $D_{sim}(d_1[\text{mV}])$ zu bestimmen und diese miteinander zu vergleichen. Der Vorteil dabei ist, daß der Zusammenhang zwischen I_0 und d_{0ch} dafür nicht bekannt sein muß.

Um die Gültigkeit der Separationsnäherung zu überprüfen, wird nun zuerst aus den Kurven der Meßreihen für die oben genannten Kombinationen V_1/V_0 eine mittlere Kurve $A_{meas,avg}$ gebildet:

$$A_{meas,avg}(d_1[\text{\AA}], V_1) \stackrel{def}{=} \frac{1}{5} \sum_{\frac{I_0}{nA} \in \{0.5, 1, 2, 5, 10\}} A_{meas}(d_{0cc}(d_{0ch}(I_0, V_0), d_1[\text{\AA}]), d_1[\text{\AA}], V_1) \quad (7.3)$$

Nun werden für jede Kombination V_1/V_0 jeweils die Kurven $A_{meas}(d_1)/A_{meas,avg}(d_1)$ für $I_0 = 0.5 \text{ nA}$, 1.0 nA , 2.0 nA , 5.0 nA und 10 nA gebildet und im Koordinatensystem dargestellt. Die Funktionen $A_{meas}(d_1)/A_{meas,avg}(d_1)$ sind für alle Meßreihen V_1/V_0 im Rahmen der Meßgenauigkeit horizontale Kurven. Die Abbildung 7.6 (c) zeigt dies am Beispiel der Meßreihe $V_1 = 200 \text{ mV}$ und $V_0 = 80 \text{ mV}$. Hieraus läßt sich schließen, daß die Separationsnäherung Gleichung 7.2 für die gemessenen Amplitudenkurven $A(d_1)$ gültig ist. Da die Theorie des SAW-STM-Signals im Constant-Current-Modus voraussagt, daß die Separationsnäherung nur für äquivalente Tunnelabstände $d_{0ch} > 2 \text{ \AA}$ gültig ist, kann also gefolgert werden, daß bei den Meßreihen immer $d_{0ch} > 2 \text{ \AA}$ galt. Die Darstellung der Kurven $A_{sim}(d_1)/A_{sim,avg}(d_1)$ für $d_{0ch} = 2.0 \text{ \AA}$, 2.1 \AA , 2.3 \AA , 2.5 \AA und 3.0 \AA , liefert, wie zu erwarten war, horizontale Kurven, weil für $d_{0ch} > 2 \text{ \AA}$ die Separationsnäherung ja gilt (Abbildung 7.6 (d)).

Im nächsten Schritt werden die gemessene und die simulierte Abstandsmodulationsfunktion bestimmt. Zu diesem Zweck wird

$$\tilde{D}_{meas}(d_1[\text{mV}]) \stackrel{def}{=} \frac{1}{5} \sum_{\frac{I_0}{nA} \in \{0.5, 1, 2, 5, 10\}} \frac{A_{meas}(d_{0cc}(d_{0ch}(I_0, V_0), d_1[\text{mV}]), d_1[\text{mV}], V_1)}{A_{meas}(d_{0cc}(d_{0ch}(I_0, V_0), d_1^0[\text{mV}]), d_1^0[\text{mV}], V_1)} \quad (7.4)$$

definiert, wobei $d_1^0[\text{mV}]$ eine bestimmte, festgehaltene Amplitude des IDT-HF-Signals ist. Durch das Teilen der $A_{meas}(d_1[\text{mV}])$ -Kurven durch den Amplitudenwert $A_{meas}(d_1^0[\text{mV}])$ werden die $A_{meas}(d_1[\text{mV}])$ -Kurven so in y-Richtung gestreckt, daß sie in $A_{meas}(d_1^0[\text{mV}])$ zusammenfallen. Die so normierten Kurven werden dann in Gleichung 7.4 gemittelt. Schreibt man in Gleichung 7.4 die $A_{meas}(d_1[\text{mV}])$ -Kurven in der Form der Gleichung 7.2, dann folgt:

$$\tilde{D}_{meas}(d_1[\text{mV}]) = \frac{1}{5} V_1 D_{meas}(d_1[\text{mV}]) \sum_{\frac{I_0}{nA} \in \{0.5, 1, 2, 5, 10\}} \frac{B_{meas}(d_{0ch}(I_0, V_0))}{A_{meas}(d_{0cc}(d_{0ch}(I_0, V_0), d_1^0[\text{mV}]), d_1^0[\text{mV}], V_1)} \quad (7.5)$$

Es ist also $\tilde{D}_{meas}(d_1[\text{mV}])$ proportional zu $D_{meas}(d_1[\text{mV}])$. Da, wie in Abschnitt 4.2.3 erläutert, die Abstandsmodulationsfunktion nur bis auf einen Vorfaktor definiert ist, kann also $\tilde{D}_{meas}(d_1[\text{mV}])$ als die gemessene Abstandsmodulationsfunktionen interpretiert werden. Gemäß Gleichung 7.4 wurden so die Abstandsmodulationsfunktionen zu den Meßreihen der Kombinationen V_1/V_0 berechnet. Ebenso wurde in Analogie zu Gleichung 7.4 aus den in Abbildung 7.6 (b) dargestellten simulierten Daten die simulierte Abstandsmodulationsfunktionen \tilde{D}_{sim} bestimmt.

Zum Vergleich der gemessenen mit der simulierten Abstandsmodulationsfunktion wird nun \tilde{D}_{meas} so in x- und in y-Richtung gestreckt, daß die Abweichung gegenüber \tilde{D}_{sim} minimal wird. Mathematisch bedeutet dies, daß die Parameter q und s der Funktion

$$\tilde{D}_{meas,fit}(d_1[\text{\AA}]) = s \tilde{D}_{meas}\left(\frac{1}{q} d_1[\text{\AA}]\right) \quad (7.6)$$

so variiert werden, daß der Verlauf der Kurve $\tilde{D}_{meas,fit}(d_1[\text{\AA}])$ dem der Kurve $\tilde{D}_{sim}(d_1[\text{\AA}])$ möglichst nahe kommt. Zu diesem Zwecke wurde ein LabVIEW-Programm geschrieben. Mit

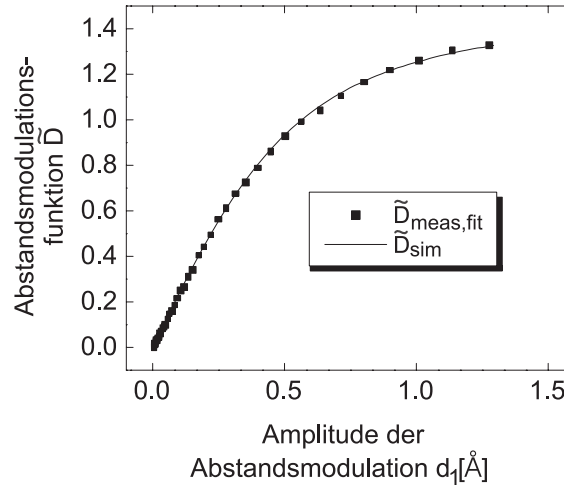


Figure 7.7: Die Absolutkalibrierung der Amplitude der Abstandsmodulation. Die Abstandsmodulationsfunktion $\tilde{D}(d_1)$ beschreibt die Abhängigkeit der Amplitude des SAW-STM-Signals von der Amplitude der Abstandsmodulation. Durch gezielte Anpassung des horizontalen und des vertikalen Maßstabes der gemessenen Abstandsmodulationsfunktion D_{meas} kann diese in eine Funktion $D_{meas,fit}$ umskaliert werden, die sich mit der simulierten Abstandsmodulationsfunktion D_{sim} deckt. Damit sind die im Experiment vorliegenden Werte der Amplitude der Abstandsmodulation in Angstrom bestimmt.

V_0 (mV)	25	50	100	150	200	400	1000
V_1 (mV)	40	80	160	240	320	400	1600
q_{opt} (mV/Å)	684	800	833	990	781	884	934
q (mV/Å)	840 ± 90						

Table 7.2: Der Proportionalitätsfaktor q zwischen der Amplitude des wellenanregenden IDT-HF-Signals und der Amplitude der Abstandsmodulation. Für jede Meßreihe mit konstanter mittlerer Tunnelspannung V_0 und Tunnelspannungsmodulation V_1 liefert der im Text beschriebene Auswerte-Algorithmus jeweils einen Proportionalitätsfaktor q_{opt} . Deren Mittelwert ist das Gesamtergebnis q .

ihm kann der Benutzer q und s variieren, während die Kurven $\tilde{D}_{meas, fit}$ und \tilde{D}_{sim} im selben Koordinatensystem dargestellt werden. Das Ergebnis für die Meßreihe $V_1 = 320$ mV, $V_0 = 200$ mV ist in Abbildung 7.7 dargestellt: Es ließen sich Werte q_{opt} und s_{opt} finden, die eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der gestreckten gemessenen und der simulierten Abstandsmodulationsfunktion liefern. Für jeden Punkt $(d_1[\text{mV}], A(d_1[\text{mV}]))$ der Meßreihe läßt sich also in Abbildung 7.7 die Amplitude der Abstandsmodulation in Angstrom ablesen. q_{opt} ist somit der in Gleichung 7.1 definierte Proportionalitätsfaktor zwischen der Amplitude des IDT-HF-Signal in mV und der Amplitude der Abstandsmodulation in Angstrom.

Dieser Auswerte-Algorithmus wurde auf die Meßreihen mit $V_1/V_0 = 50$ mV/20 mV, 100 mV/40 mV, 200 mV/80 mV, 300 mV/120 mV, 400 mV/160 mV, 800 mV/320 mV, 2000 mV/800 mV angewendet. In allen Fällen konnte eine gute Übereinstimmung zwischen $\tilde{D}_{meas, fit}$ und \tilde{D}_{sim} erzielt werden. Die errechneten optimalen Proportionalitätsfaktoren q_{opt} , sowie ihr Mittelwert q und als Fehler die Standardabweichung sind in der Tabelle 7.2 zusammengefaßt. Es konnte kein Zusammenhang zwischen q_{opt} und der mittleren Tunnelspannung V_0 bzw. der Tunnelspannungsmodulation V_1 gefunden werden. Dies steht im Einklang mit der Theorie, denn nach Gleichung 4.10 hängt die Abstandsmodulationsfunktion nicht von V_0 ab. Die Abweichungen zwischen den bei verschiedenen Kombinationen V_1/V_0 gemessenen Proportionalitätsfaktoren erklären sich aus der Tatsache, daß sich während der Messungen wegen der Drift die Oberflächenneigung am Ort des Tunnelns änderte. Mit der Wahl der Amplitude des IDT-HF-Signal sind die Amplituden u_1 , u_2 und u_3 der SAW festgelegt, die Amplitude $d_1[\text{Å}]$ der Abstandsmodulation ist nach Gleichung 4.53 aber gleichzeitig eine Funktion der Steigungswinkel γ_x oder γ_y . Dieser Einfluß kann in zukünftigen Messungen umgangen werden, indem die Abhängigkeit $A(d_1[\text{mV}])$ auf atomar glatten Terrassen aufgenommen wird. Hier ist dann $d_1[\text{Å}]$ gleich u_3 , der Amplitude der Verschiebungskomponente der SAW senkrecht zur Probenoberfläche. Zusammen mit der in Abschnitt 7.4.1 durchgeführten Messung des Ellipsenwinkels β wäre damit die Oszillationsellipse der Rayleighwelle komplett ausgemessen. Wir erwarten, daß sich die ohnehin geringe Streuung der gemessenen Proportionalitätsfaktoren q_{opt} von 10% bei einer Messung auf atomar glatten Terrassen weiter verringert. Die hier vorgeführte kalibrierte Messung der Amplitude der Abstandsmodulation stellt ein zentrales Ergebnis dieser Arbeit dar.

Die Theorie des SAW-STM-Signals im Constant-Current-Modus (Abschnitt 4.2.3) sagt voraus,

daß der minimale Tunnelabstand, der während eines Oszillationszyklus auftritt, sich mit zunehmender Wellenamplitude asymptotisch der Null nähert ("asymptotischer Tip-Crash"). Dies impliziert, daß bei großen SAW-Amplituden der Tunnelstrom während eines Oszillationszyklus sehr hohe Werte annimmt. Auch wenn, wie im Abschnitt 4.2.1 erläutert, der zeitliche Verlauf des Tunnelstromes mit dem STM nicht aufgelöst werden kann, wurde im Experiment beobachtet, daß der Tunnelstrom mit zunehmender SAW-Amplitude instabil wird. Dies steht im Einklang mit dem theoretisch erwarteten asymptotischen Tip-Crash.

7.3.2 Die Abhängigkeit der Amplitude vom Tunnelstrom

Für das im Constant-Current-Modus durchgeführte SAW-STM-Experiment wurde im Abschnitt 4.2.3 das Verhalten der Amplitude A des SAW-STM-Signals bei Änderung des Soll-Tunnelstromes I_0 simuliert. In diesem Abschnitt werden nun Meßreihen diskutiert, die zur Überprüfung dieser theoretischen Vorhersagen durchgeführt wurden. Es wurde die Amplitude für die Kombinationen $V_1/V_0 = 50 \text{ mV}/20 \text{ mV}$, $200 \text{ mV}/80 \text{ mV}$, $300 \text{ mV}/120 \text{ mV}$, $400 \text{ mV}/160 \text{ mV}$, $800 \text{ mV}/320 \text{ mV}$ aufgezeichnet, wobei die IDT-HF-Signal-Amplituden $d_1 [\text{mV}] = 10 \text{ mV}$, 20 mV , 50 mV , 100 mV , 500 mV , 100 mV eingestellt und I_0 im Bereich $0 - 12 \text{ nA}$ variiert wurde. Wie bei der Messung der Abhängigkeit $A(d_1)$ wurde das STM im Constant-Current-Modus betrieben und die Spitze wurde bis auf die Drift an einer festen Position gehalten. Die Abbildung 7.8 zeigt neben der weiter unten erklärten Vergleichssimulation das Ergebnis der Meßreihe $V_1/V_0 = 200 \text{ mV}/80 \text{ mV}$. Unter Verwendung der im vorhergehenden Abschnitt 7.3.1 Kalibrierung der Amplitude der Abstandsmodulation wurden die IDT-HF-Signal-Amplituden $d_1 [\text{mV}]$ in Angstrom umgerechnet, was die Werte $d_1 [\text{Å}] = 0.012 \text{ Å}$, 0.024 Å , 0.06 Å , 0.12 Å , 0.24 Å , 0.6 Å und 1.2 Å ergibt. Von Meßfehlern abgesehen, liegen die Kurven $A(I_0)$ auf Ursprungsgeraden.

Um dieses Ergebnis mit der Theorie zu vergleichen, wurden $A(I_0)$ -Kurven bei den in der Messung eingestellten Werten für $d_1 [\text{Å}]$ simuliert. Prinzipiell ist es unmöglich, den Zusammenhang zwischen den Tunnelströmen des Experiments und der Simulation zu ermitteln: Der in Gleichung 4.20 eingeführte Tunnelstrom bezieht sich auf eine Einheitsfläche. Aus ihm kann der Tunnelstrom im Experiment aber nicht geschlossen werden, weil die effektive Fläche der Tunnelspitze nicht meßbar ist. Aus demselben Grund können die Amplitudenmaßstäbe der Messung und der Simulation nicht ineinander umgerechnet werden. Um die gemessenen mit den simulierten $A(I_0)$ -Kurven trotzdem zu vergleichen, wird ähnlich wie bei der Absolutkalibrierung der Amplitude der Abstandsmodulation (Abschnitt 7.3.1) der x- und der y-Maßstab der simulierten Kurven so verändert, daß sich die beste Übereinstimmung mit den gemessenen $A(I_0)$ -Kurven ergibt. Die so gestreckten simulierten $A(I_0)$ -Kurven sind in Abbildung 7.8 eingezeichnet. Die eingezeichneten Fehlerbalken geben den Fehler der simulierten Amplitude bei $I_0 = 12 \text{ nA}$ an. Sie resultieren aus dem Fehler von 10% bei der Umrechnung der eingestellten IDT-HF-Signal-Amplituden in die Amplituden der Abstandsmodulation, für die die Simulationen durchgeführt wurden. Es läßt sich zeigen, daß die Länge der Fehlerbalken

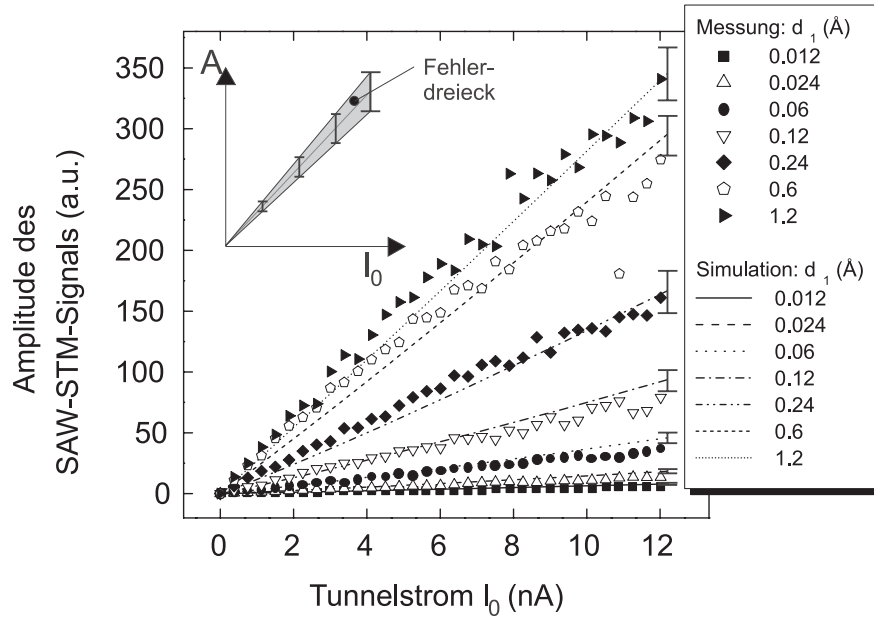


Figure 7.8: Der Einfluß des mittleren Tunnelstroms auf die Amplitude des SAW-STM-Signals. Im untersuchten Bereich des mittleren Tunnelstrom I_0 zeigt die gemessene Amplitude des SAW-STM-Signals eine lineare Abhängigkeit von I_0 , wobei die Steigung von der Amplitude d_1 der Abstandsmodulation abhängt. Der relative Fehler der simulierten Amplitude beträgt, wie im Text erläutert, 10%. Dies führt zum eingezeichneten Fehlerdreieck, das alle für einen Wert d_1 simulierten Amplitudenkurven umfaßt, die dieser relative Fehler zuläßt. Die gemessenen Amplituden liegen weitgehend innerhalb dieser Fehlerdreiecke; dies ist eine Bestätigung der Theorie des SAW-STM-Signals im Constant-Current-Modus.

für den Bereich $0 \text{ nA} < I_0 < 12 \text{ nA}$ proportional zu I_0 ist. Wie in der eingesetzten Zeichnung der Abbildung 7.8 dargestellt, ergeben die Fehlerbalken einer simulierten $A(I_0)$ -Kurven das sogenannte Fehlerdreieck. Die Meßpunkte liegen weitgehend in den entsprechenden Fehlerdreiecken.

Die Streckung der simulierten Kurven bis zur besten Übereinstimmung mit den gemessenen ist jedoch nicht eindeutig: Wie bereits im Abschnitt 4.2.3 an der Abbildung 4.8 (b) diskutiert worden ist, weisen die simulierten $A(I_0)$ -Kurven eine leichte Linkskrümmung auf, die für kleine Tunnelströme in einen linearen Verlauf übergeht. Bei den Meßreihen ließ sich jedoch nur ein linearer Verlauf beobachten. Diese scheinbare Diskrepanz läßt sich auflösen, indem man annimmt, daß im Experiment keine so hohen Tunnelströme I_0 erreicht wurden, bei denen in der Simulation die Linkskrümmung vorliegt. Auf Basis dieser Annahme wurden in der Abbildung 7.8 die simulierten Kurven so gestreckt, daß im Bildausschnitt nur der lineare Teil nahe dem Koordinatenursprung in Abbildung 4.8 (b) auftritt. Hieraus folgt aber, daß eine Schar simulierter Kurven, die gut mit den gemessenen übereinstimmt, durch Streckung in x- und y-Richtung um denselben Faktor, in sich selbst überführt werden kann. Daher ist die hier beschriebene Anpassung des I_0 - und des Amplituden-Maßstabes der simulierten $A(I_0)$ -

Kurven nicht eindeutig⁴. Das Ziel dieses Abschnittes ist dennoch erreicht worden: Im Rahmen der Meßgenauigkeit bestätigt die gemessene Abhängigkeit der Amplitude vom Tunnelstrom die Theorie des SAW-STM-Signals im Constant-Current-Modus.

7.3.3 Die Abhängigkeit der Amplitude von der Tunnelspannung und ihrer Modulation

Dieser letzte Schritt zur experimentellen Überprüfung der Theorie des SAW-STM-Signals im Constant-Current-Modus widmet sich dem Einfluß der mittleren Tunnelspannung V_0 und der Amplitude der Tunnelspannungsmodulation V_1 auf die Amplitude des SAW-STM-Signals. Die Theorie (siehe Gleichung 4.35) sagt voraus, daß die Amplitude exakt proportional zu V_1 ist. Ebenfalls im Abschnitt 4.2.3 wurde die Abhängigkeit von V_0 simuliert. Zur Überprüfung dieser theoretischen Vorhersagen wurde bei einem IDT-HF-Signal von $d_1 [\text{mV}] = 100 \text{ mV}$, bei den Tunnelströmen $I_0 = 0.5 \text{ nA}, 1 \text{ nA}, 2 \text{ nA}, 5 \text{ nA}$ und 10 nA und bei den V_0 -Werten $5 \text{ mV}, 10 \text{ mV}, 20 \text{ mV}, 50 \text{ mV}, 100 \text{ mV}, 200 \text{ mV}$ und 500 mV V_1 im Bereich $0\text{--}100 \text{ mV}$ variiert und die Amplitude aufgezeichnet.

Die bei einem mittleren Tunnelstrom von $I_0 = 1 \text{ nA}$ gemessene Amplitude des SAW-STM-Signals ist in der Abbildung 7.9 (a) über V_1 aufgetragen. Sowohl bei dieser als auch bei anderen mittleren Tunnelströmen durchgeführten Meßreihen scheint auf den ersten Blick die theoretisch erwartete Proportionalität der Amplitude zu V_1 vorzuliegen. Bei näherem Hinsehen ist jedoch bei allen $A(V_1)$ -Kurven eine leichte Rechtskrümmung zu verzeichnen, die der Theorie widerspricht. Dies weist darauf hin, daß die Spannungsabhängigkeit des Tunnelstromes nicht wie in der Simmonsschen Gleichung 4.8 perfekt ohmsch ist.

Um den Einfluß der mittleren Tunnelspannung V_0 auf die Amplitude zu untersuchen, wird nun vorerst die geringe Nichtlinearität der $A(V_1)$ -Kurven vernachlässigt und angenommen, daß gemäß der Gleichung 4.41 A/V_1 nicht von V_1 abhängt. Für jede Meßreihe wurden die Kurven $A(V_1)/V_1$ gebildet, die im Rahmen dieser Vereinfachung horizontale Kurven sind. Aus ihnen wurde für jeden Wert I_0 und V_0 der Mittelwert $\overline{A(V_1)/V_1}$ gebildet und doppellogarithmisch über V_0 dargestellt (Abb. 7.9 (b)). Der Fehler der Meßpunkte ist dabei die Standardabweichung der Verteilung der $A(V_1)/V_1$ -Werte. Im Rahmen der Meßgenauigkeit liegen die Werte $\overline{A(V_1)/V_1}$ für jeweils einen mittleren Tunnelstrom auf einer Geraden. Dies entspricht dem Ergebnis der in Abbildung 4.12 (a) dargestellten Simulation; dort wurde für verschiedene äquivalente Tunnelabstände die Abhängigkeit der Amplitude von V_0 bei konstantem V_1 simuliert. Man erhielt Geraden, deren mittlere doppellogarithmische Steigung -1.05 beträgt. Die Steigung $\partial \log \overline{A(V_1)/V_1} / \partial \log V_0$ der gemessenen $\overline{A(V_1)/V_1}(V_0)$ -Kurven ist im Einsatz der Abbildung 7.9 (b) über dem mittleren Tunnelstrom I_0 dargestellt. Ihr Mittelwert liegt im Gegensatz zur Simulation bei -0.80 ; der Bereich der angenommenen Steigungswerte ist $[-0.83, -0.75]$. Dieses Intervall ist disjunkt zu dem Wertebereich der Steigung, die im Abschnitt 4.2.3 für die typischerweise vorliegenden Parameter $d_{0ch}@V_0 = 1 \text{ V} \in [0.5 \text{ nA}, 10 \text{ nA}]$

⁴Im Gegensatz hierzu ist die Streckung der gemessenen $A(d_1)$ -Kurven bis zur Übereinstimmung mit den simulierten Kurven eindeutig, weil die $A(d_1)$ -Kurven deutlich gekrümmt sind.

und $d_1 \in [0.02 \text{ \AA}, 5 \text{ \AA}]$ durch Simulation errechnet wurden (Abbildung 4.12 (c) und (d)). Ein möglicher Grund für diese geringe Abweichung zwischen gemessener und simulierter Steigungen $\partial \log A / \partial \log V_0$ ist die Unkenntnis der reziproken Abklinglänge κ , die als Parameter in die Simulation eingeht. Sie kann durch Verunreinigungen deutlich vom Literaturwert ($\kappa = 1.19 \text{ \AA}$ bei Gold) abweichen. Die Abhängigkeit der Steigung $\partial \log A / \partial \log V_0$ von κ wurde für $d_{0ch} = 2.95 \text{ \AA}$ (bei $V_0 = 1 \text{ V}$) und $d_1 = 1 \text{ \AA}$ simuliert und in Abbildung 7.10 dargestellt. Es ist ersichtlich, daß bei einer Abweichung von κ vom Literaturwert um eine Größenordnung die experimentell gemessene mittlere Steigung -0.80 nicht angenommen wird. Dies zeigt, daß auch durch Variation der reziproken Abklinglänge in der Simulation keine exakte Übereinstimmung zwischen der theoretisch erwarteten und der gemessenen funktionalen Abhängigkeit der Amplitude von der mittleren Tunnelspannung V_0 erzielt werden kann. Vielmehr liegt die Interpretation nahe, daß eine Abweichung vom exakt ohmschen Verhalten des Tunnelstromes, vom dem die Theorie ausgeht, der Grund für diese Diskrepanz ist. Wie oben erläutert, wird dies ebenfalls als Grund für die geringe Nicht-Linearität in der V_1 -Abhängigkeit der Amplitude angesehen.

Zur Weiterentwicklung der Theorie des SAW-STM-Signals im Constant-Current-Modus kön-

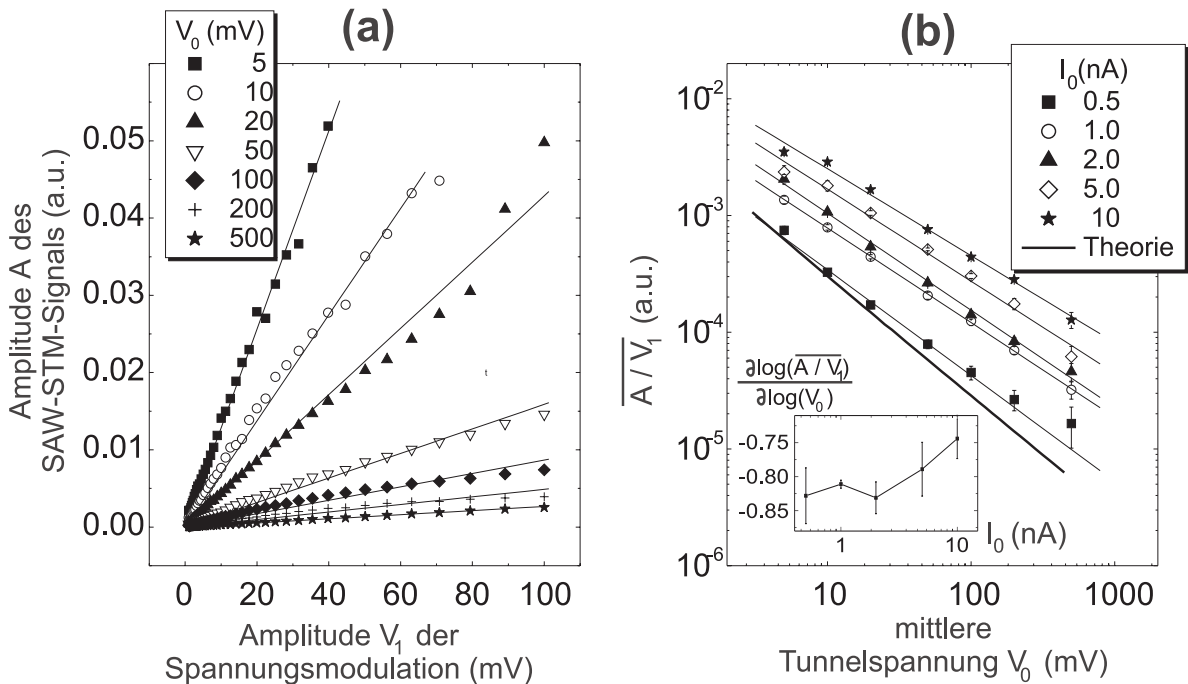


Figure 7.9: Die Abhängigkeit der gemessenen Amplitude von der Tunnelspannung und ihrer Modulation. (a) Bis auf eine geringe Linkskrümmung ist die Amplitude proportional zur Amplitude der Spannungsmodulation. Die Steigung der Ausgleichsgeraden hängt von der mittleren Tunnelspannung V_0 ab. **(b)** In der doppellogarithmischen Darstellung der mittleren Steigung der gemessenen $A(V_1)$ -Kurven über V_0 ergeben sich Geraden, deren Steigung vom mittleren Tunnelstrom I_0 abhängt (Einsatz). Die Theorie sagt eine betragsmäßig um 35% größere Steigung voraus.

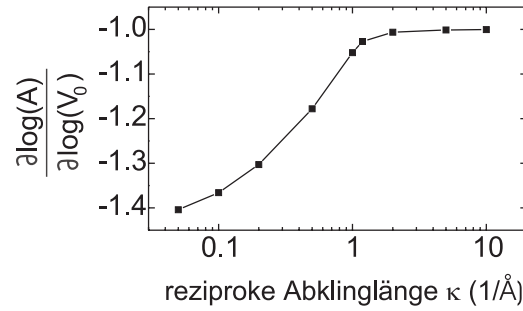


Figure 7.10: Der Einfluß der reziproken Abklinglänge auf die doppellogarithmische Ableitung der Amplitude A nach der mittleren Tunnelspannung V_0 (Simulation).

nte die Spannungsabhängigkeit des Tunnelstromes experimentell bestimmt und in Form einer endlichen Taylor-Reihe dargestellt werden. Dies würde die analytische Berechnung der Amplitude des SAW-STM-Signals komplexer machen; es ist aber zu erwarten, daß die V_0 - und die V_1 -Abhängigkeit der Amplitude dann realistischer beschrieben werden. Dennoch läßt sich abschließend feststellen, daß die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Theorie den Einfluß von V_0 und V_1 in befriedigender Weise beschreibt.

7.4 Das UHV-SAW-STM im Scanbetrieb

Läuft eine akustische Oberflächenwelle über die Probe im STM, so bewegt sich jeder Punkt der Oberfläche auf einer zyklischen Bahn, die im Falle der Rayleigh-Welle die in Abb. 4.13 beschriebene Oszillationsellipse ist. Sie vollständig auszumessen, ist das zentrale Ziel der vorliegenden Arbeit. Im Abschnitt 7.3.1 wurde vorgeführt, wie mit dem SAW-STM die Amplitude d_1 der Modulation des Tunnelabstandes absolut kalibriert gemessen werden kann. Geschieht dies auf einer unkorrigierten Oberfläche, ist d_1 gleich der vertikalen Halbachse u_3 der Oszillationsellipse; u_3 ist experimentell also meßbar. Um die Geometrie der Oszillationsellipse vollständig zu beschreiben, ist zusätzlich die Kenntnis des Ellipsenwinkels β (Abb. 4.13) nötig, denn, ist auch β bekannt, läßt sich aus u_3 die horizontale Halbachse u_1 errechnen. In diesem Abschnitt wird nun eine im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Methode vorgeführt, mit der der Ellipsenwinkel β mit dem SAW-STM experimentell bestimmt werden kann. Wurde bei den bisher vorgestellten Experimenten die Spitze an einem festen Ort gelassen, läßt man nun die Spitze die Probe im Constant-Current-Modus abrastern. Zusätzlich zum Topographie-Signal wird dabei die Amplitude und die Phase des SAW-STM-Signals aufgezeichnet. Ein Scan des SAW-STM liefert also ein Topographie-, ein Amplituden- und ein Phasenbild. Nach der Theorie des SAW-STM-Signals auf der korrigierten Oberfläche errechnen sich die Amplitude und die Phase der Abstandsmodulation aus γ_x und γ_y , also den Neigungswinkeln der Probenoberfläche parallel bzw. senkrecht zur Wellenausbreitungsrichtung, sowie aus β (Gleichung 4.53). Das Amplituden- und das Phasenbild sind also über den Ellipsenwinkel β mit dem Topographiebild verknüpft. Im diesem Abschnitt wird gezeigt, wie anhand des Topographie- und des Phasenbildes β und zusätzlich die Ausbreitungsrichtung der SAW bestimmt werden können. Abschließend werden Amplitudenbilder diskutiert und mit den Vorhersagen der Theorie des SAW-STM-Signals auf der korrigierten Oberfläche verglichen.

7.4.1 Die experimentelle Bestimmung der Exzentrizität der Oszillationsellipse

Anhand der in Abb. 26 dargestellten Messung wird nun vorgeführt, wie aus den gemessenen Bildern der Topographie und der Phase sowohl der Ellipsenwinkel β als auch die Ausbreitungsrichtung α ermittelt werden können. Die Messung wurde bei einem Tunnelstrom von $I_0 = 1$ nA und einer Tunnelspannung von $V_0 = 100$ mV, die mit einer Amplitude von 40 mV moduliert wurde, durchgeführt. Die Amplitude des HF-IDT-Signals, das die SAW erzeugt, betrug 400 mV. Der Interdigitalwandler wurde bei der Frequenz $f_{SAW} = 40.7$ MHz betrieben, bei der die Amplitude des SAW-STM-Signals, im folgenden kurz "die Amplitude" genannt, maximal war. Die Differenzfrequenz zwischen der Tunnelspannungsmodulation und der SAW betrug 70 kHz.

Das Topographiebild Abb. 26 (f) zeigt Körner des Goldfilmes verschiedener Größe, deren Gestalt und deren Detail auch im Phasen- und im Amplitudenbild (Abb. 26 (e) und (j)) deutlich zu erkennen sind. Um zu prüfen, inwieweit die Theorie des SAW-STM-Signals auf der

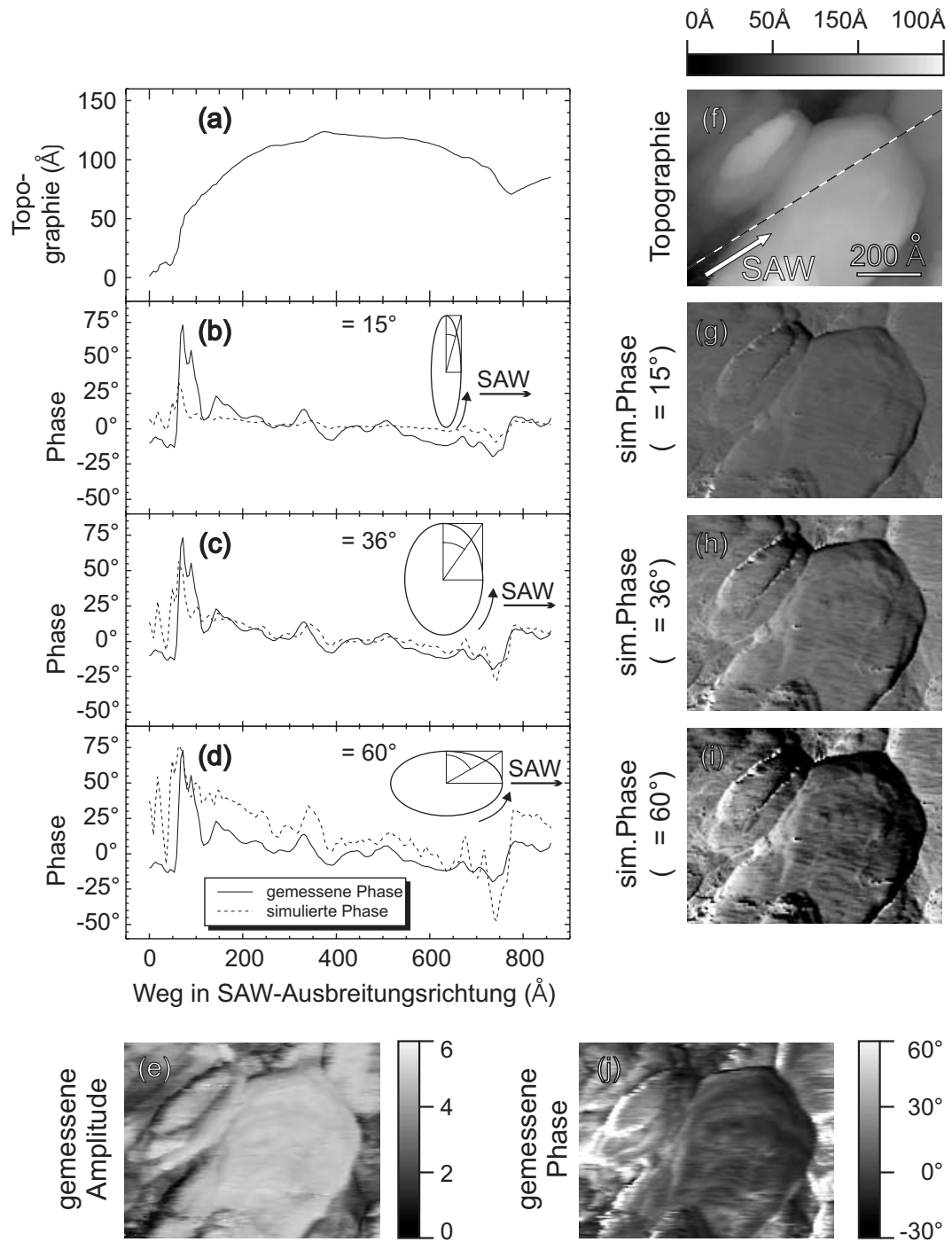


Figure 7.11: Die Abbildung von Goldkörnern mit dem UHV-SAW-STM. Das SAW-STM liefert im Scanbetrieb die Topographie (f), die gemessene Amplitude (e) und die gemessene Phase (j) des SAW-STM-Signals. Ausgehend von der Topographie wurden für die Ellipsenwinkel $\beta = 15^\circ$ (g), $\beta = 36^\circ$ (h) und $\beta = 60^\circ$ (i) die Phasenbilder simuliert. Wie in (b)-(d) eingezeichnet, parametrisiert β die Exzentrizität der Oszillationsellipse. Profile der Topographie, der gemessenen und der simulierten Phasen entlang der gestrichelten Linie in (f) sind in (a)-(d) dargestellt. Die beste Übereinstimmung zwischen gemessener und der simulierter Phase wird bei $\beta = 36^\circ$ erzielt.

korrigierten Oberfläche den Zusammenhang zwischen gemessener Topographie und Phase beschreibt, wurde für die Wellenausbreitungsrichtung $\alpha = 32^\circ$ und für die Ellipsenwinkel $\beta = 15^\circ, 36^\circ$ und 60° mit dem Programm "numerical_amp_phase" (siehe Abschnitt 5.3) aus der gemessenen Topographie das Phasenbild simuliert (Abb. 26 (g), (h) und (i)). Der Phasenkontrast nimmt erwartungsgemäß mit steigendem β zu, die beste Übereinstimmung mit der gemessenen Phase liefert die Simulation $\beta = 36^\circ$. Die Phasenprofile Abb. 26 (b), (c) und (d) entlang der gestrichelten Linie in Abb. 26 (f), die in Wellenausbreitungsrichtung verläuft, verdeutlichen dieses Ergebnis: Bei einem Ellipsenwinkel von $\beta = 36^\circ$ zeichnet die simulierte Phase die gemessene weitgehend detailgetreu nach, während bei $\beta = 15^\circ$ ein zu geringer und bei $\beta = 60^\circ$ ein zu starker Phasenkontrast besteht.

Mit Hilfe des Programmes "measure_ellipse_with_phase" (vergleiche 5.4) werden nun der optimale Ellipsenwinkel β_{opt} und die optimale Wellenausbreitungsrichtung α_{opt} bestimmt, bei der die Abweichung zwischen dem simulierten und dem gemessenen Phasenbild minimal ist. Es wird hierbei für eine Menge von Wertepaaren $(\beta_i, \alpha_i) \in [0^\circ, 90^\circ] \times [-180^\circ, 180^\circ]$ der Phasenkorrelationsfehler E_Φ berechnet und in Form eines Fehlerfeldes dargestellt. Damit aus dem Topographiebild Phasenbilder berechnet werden können, muß ersteres geringfügig geglättet werden, um eventuelles Rauschen im Bild wegzumitteln. Geschieht dies nicht, beeinträchtigt das Rauschen die bei der Simulation durchgeführte Differenziation des Topographiebildes. Das so gewonnene Fehlerfeld ist in Abb. 7.12 (a) dargestellt: Es hat in eindeutiger Weise ein deutliches Minimum bei den Winkeln $\beta_{opt} = 36^\circ$ und $\alpha_{opt} = 32^\circ$, die demnach als der gemessene Ellipsenwinkel bzw. als die Wellenausbreitungsrichtung interpretiert werden. Der gewonnene Wert für β liegt somit nahe beim Literaturwert $\beta_{lit} = 35.1^\circ$ [93].

Um die Aussagekraft dieses Ergebnisses beurteilen zu können, muß nun ein Meßfehler für die Genauigkeit von β und α definiert werden. Die in Abb. 7.12 (b) und (c) dargestellten Fehlerprofile $E_\Phi(\beta) |_{\alpha=\alpha_{opt}}$ und $E_\Phi(\alpha) |_{\beta=\beta_{opt}}$ zeigen, daß das Minimum des Phasenkorrelationsfehlers in α -Richtung scharf, dasjenige in β -Richtung jedoch relativ langgezogen ist. Würde man die Breite dieser Minima der Fehlerprofile als Meßfehler definieren, dann würde man also schließen, daß der Meßfehler von α geringer als der von β ist. Diese Fehlerdefinition ist jedoch nicht gerechtfertigt, weil die Lage des Minimums des Fehlerfeldes vom Grad der Glättung des auszuwertenden Topographiebildes abhängt. Daher ist der Grad der Glättung für die Unsicherheit der gemessenen optimalen Winkel maßgeblich. Wie im Abschnitt 5.2 erläutert, glättet das Hauptprogramm "SAW-Viewer" SAW-STM-Bilder, indem diese mit einem rotationssymmetrischen Gaußprofil $e^{-(x^2+y^2)/a^2}$ gefaltet werden. Hierbei ist die Breite a des Glättungsprofils ein Maß für den Grad der Glättung. Es wurden anhand der in Abb. 26 dargestellten Messung β_{opt} und α_{opt} für unterschiedliche Breiten a berechnet und über a aufgetragen (Abb. 7.13). Der gemessene Ellipsenwinkel steigt mit dem Grad der Glättung und nimmt Werte zwischen 21° und 43° an. Ebenfalls steigt der gemessene Winkel der Ausbreitungsrichtung mit a an und liegt im Intervall 18° bis 36° . Es stellt sich nun die Frage, welcher Grad des Glättens legitim ist, um ein aussagekräftiges Resultat zu erhalten. Ist die Breite des Glättungsprofils zu klein, bleibt das Rauschen im Topographiebild von der Glättung unbeeinflusst und verfälscht

die Lage des Minimums des Fehlerfeldes. Im Falle einer zu starken Glättung, also eines großen a , werden alle realen Oberflächenstrukturen, deren Abmessung kleiner als a ist, abgeflacht. In diesem Fall hat die geglättete Topographie geringere Gradienten als die reale. Folglich muß ein größerer Ellipsenwinkel angenommen werden, damit das simulierte Phasenbild den Kontrast des gemessenen hat. Der optimale Ellipsenwinkel ist also im Falle einer zu starken Glättung zu hoch. Der Wert β_{opt} , der den im realen Experiment vorliegenden Ellipsenwinkel widerspiegelt, kann also nur mit einer mittleren Breite a des Glättungsprofils erzielt werden. Um diese optimale Breite zu finden, ist eine genaue Analyse des Einflusses des Rauschens und der Glättung auf den Phasenkorrelationsfehler zwischen gemessener und simulierter Phase nötig; diese mathematisch komplexe Aufgabe wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht angegangen. Stattdessen wird ein einfacheres Kriterium für die Wahl der Stärke der Glättung der Topographie vorgeschlagen: Die Breite a des Glättungsprofils muß so gewählt sein, daß das Rauschen weitgehend unterdrückt ist, die realen Oberflächenstrukturen aber noch erhalten bleiben.⁵ Hieraus ergibt sich ein Bereich $[a_{min}, a_{max}]$ von möglichen Breiten a , die dieses Kriterium erfüllen. Durch Betrachten der geglätteten Bilder der in Abb. 26 vorgestellten Topographie wurden die

⁵Damit eine solche Breite a gefunden werden kann, muß aber das Rauschen kurzwelliger als die im STM-Experiment aufgelösten Oberflächendetails sein.

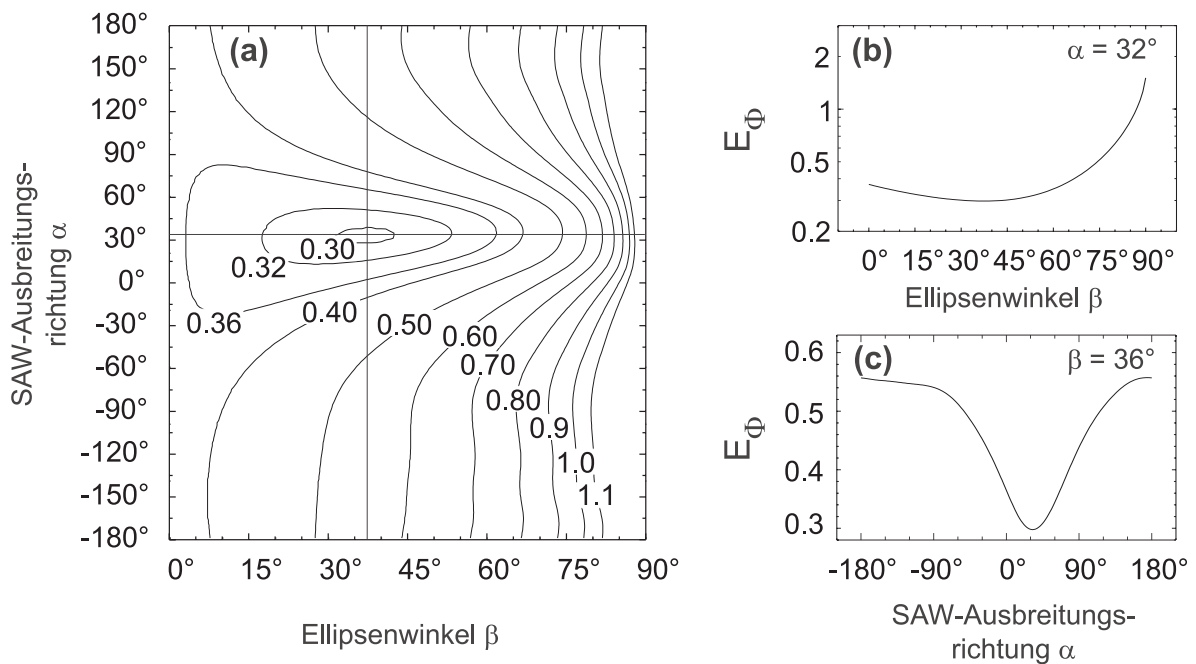


Figure 7.12: Fehlerfeld des Phasenkorrelationsfehlers. Der Phasenkorrelationsfehler E_Φ beschreibt die Abweichung zwischen einem gemessenen Phasenbild und einem Phasenbild, das aus einem gemessenen Topographiebild für eine SAW-Ausbreitungsrichtung α und einen Ellipsenwinkel β simuliert wurde. (a) zeigt das Fehlerfeld $E_\Phi(\beta, \alpha)$ der im Text diskutierten SAW-STM-Messung an Goldkörnern. Das Minimum markiert die optimalen Werte α und β , für die die Simulation der Messung am nächsten kommt. Profile durch dieses Minimum entlang der in (a) eingezeichneten Linien sind in (b) und (c) eingezeichnet.

Werte $a_{min} = 4 \text{ \AA}$ und $a_{max} = 7 \text{ \AA}$ ermittelt. Kritisch anzumerken ist, daß diese Vorgehensweise vom Augenmaß des Betrachters abhängt und somit nicht rein objektiv ist. Dem so gewonnenen Bereich möglicher Breiten $[a_{min}, a_{max}] = [4 \text{ \AA}, 7 \text{ \AA}]$ kann durch Interpolation an der gemessenen Kurve $\beta_{opt}(a)$ (Abb. 7.13 (a)) ein Bereich $[\beta_{opt,min}, \beta_{opt,max}] = [32^\circ, 39^\circ]$ zugeordnet werden. Aus diesem Intervall wird nun der fehlerbehaftete Meßwert des Ellipsenwinkels errechnet: Der Mittelwert des Intervalls $(\beta_{opt,max} + \beta_{opt,min})/2$ wird der Meßwert und die halbe Spanne des Intervalls $(\beta_{opt,max} - \beta_{opt,min})/2$ als der Meßfehler betrachtet. Somit lautet der gemessene Ellipsenwinkel $\beta_{meas} = 36^\circ \pm 4^\circ$. In diesem Fehler ist noch nicht die Unsicherheit in der Kalibrierung des lateralen und des vertikalen Maßstabes des Rastertunnelmikroskops berücksichtigt. Wie in den Abschnitten 7.1.1 und 7.1.2 gezeigt wurde, beträgt der relative Fehler im lateralen und im vertikalen Bildmaßstab 2%. Der durch diese Kalibrierungsunsicherheit bedingte Fehler der Auslenkungskomponenten u_1 und u_3 beträgt somit ebenfalls 2%. Gemäß der Definition $\beta \stackrel{def}{=} \arctan(u_1/u_3)$ ergibt sich für den Ellipsenwinkel $\beta = 36^\circ$ ein Fehler von $\pm 2^\circ$, der zu dem oben ermittelten Meßfehler addiert werden muß. Der gemessene Ellipsenwinkel beträgt also unter Berücksichtigung der Kalibrierungsunsicherheit $\beta_{meas} = 36^\circ \pm 6^\circ$. Dies ist ein erfreuliches Ergebnis, denn der Literaturwert $\beta_{lit} = 35.1^\circ$ liegt im Fehlerintervall. Neben der absolut kalibrierten Messung der Amplitude der Abstandsmodulation stellt die hier vorgeführte Bestimmung des Ellipsenwinkels das zweite zentrale Ergebnis dieser Arbeit dar. Wie eingangs erläutert, ist es hiermit gelungen, die Oszillationsellipse einer Rayleighwelle vollständig auszumessen. Ein positives Ergebnis ist ebenfalls, daß zur Berechnung des Fehlerfeldes des Phasenkorrelationsfehlers nicht der gesamte Scan ausgewertet werden muß. Es gelang, an den hier diskutierten Meßdaten Fehlerfelder zu erzeugen, bei denen nur Ausschnitte einer Größe von $30 \text{ \AA} \times 30 \text{ \AA}$ ausgewertet wurden. Trotz dieser kleinen Fläche und der damit verbundenen geringen Anzahl ausgewerteter Topographie-Merkmale hatte das resultierende Fehlerfeld ein deutlich erkennbares Minimum an einer physikalisch sinnvollen Stelle $(\beta_{opt}, \alpha_{opt})$. Dies zeigt, daß mit dem UHV-SAW-STM die Oszillationsellipse lateral mit einer Auflösung von etwa 10 atomaren Abständen ausgemessen werden kann. Sollte es in Zukunft gelingen, in der Topographie und in der Phase einzelne Atome aufzulösen, kann überprüft werden, ob auswertbare Fehlerfelder auf der Basis einer Fläche nur weniger Atome errechnet werden können. Damit wäre es gelungen, durch die Beobachtung weniger Atome mit dem SAW-STM die oszillatorische Bewegung einzelner Atome auszumessen.

Kritisch betrachtet werden muß der Verlauf des Winkels α der SAW-Ausbreitungsrichtung als Funktion der Breite a des Glättungsprofils. Auch hier muß davon ausgegangen werden, daß die reale Ausbreitungsrichtung im Intervall $[a_{min}, a_{max}]$ angenommen wird. Dies bedeutet, daß sie sich also dann ergibt, wenn durch die Glättung das Rauschen in der Topographie unterdrückt worden ist, die realen Oberflächendetails durch die Glättung aber nicht abgeflacht worden sind. Der somit aus Abb. 7.13 (b) resultierende Winkelbereich $[\alpha_{opt,min}, \alpha_{opt,max}] = [26^\circ, 34^\circ]$ entspricht jedoch nicht der Erwartung. Der auf der Probe befindliche Interdigitalwandler ist so ausgerichtet, daß die Welle mit einem Fehler von wenigen Grad von rechts nach links durch das Bild (f) laufen müßte; dies entspricht einem Winkel α von wenigen Grad. Für die Abwe-

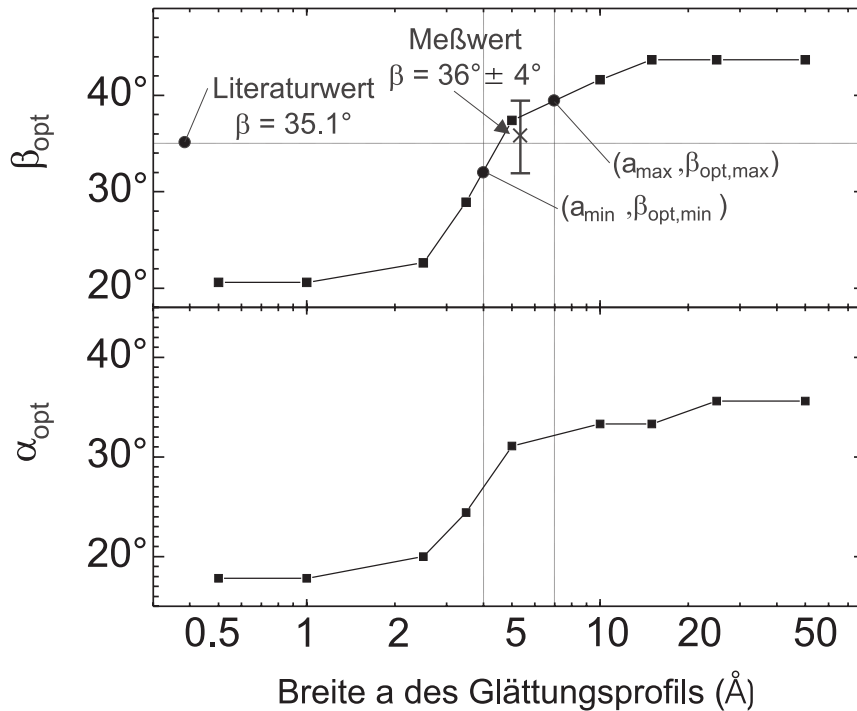


Figure 7.13: Der Einfluß der Glättung auf das Minimum des Fehlerfeldes. Die Breite a des Glättungsprofils ist ein Maß dafür, wie stark das gemessene Topographiebild, anhand dessen das Phasenbild simuliert wird, geglättet wird. Wegen des Einflusses der Glättung auf das Rauschen und auf die reale Korrugation der gemessenen Topographie hängen die SAW-Ausbreitungsrichtung α_{opt} und der Ellipsenwinkel β_{opt} , die anhand des Fehlerfeldes bestimmten wurden, von a ab. Indem, wie im Text beschrieben, der Bereich der möglichen Breiten a eingeschränkt wird, erhält man einen Meßwert für den Ellipsenwinkel, in dessen Fehlerintervall der Literaturwert liegt.

ichung der gemessenen Ausbreitungsrichtung von diesem zu erwartenden Winkel kann mitunter die laterale Drift verantwortlich sein, die zu einer Scherung der gemessenen Bilder führt und somit die getreue Winkelabbildung stört. Zwar konnte der Einfluß der Drift bei der Kalibrierung des lateralen Maßstabes (siehe Abschnitt 7.1.1) weitgehend unterdrückt werden, eine laterale Drift im Betrieb des SAW-STM ist aber häufig beobachtet worden. Sie ist hauptsächlich auf die vom Interdigitalwandler erzeugte Wärme zurückzuführen und läßt sich auch durch einen Betrieb des Wandlers über viele Stunden nicht ausschließen. Auch kommt die Drift deshalb zum Tragen, weil die Messung von SAW-STM-Bildern bei einer angemessenen geringen Scangeschwindigkeit bis zu einer Stunde dauern kann. Auch läßt sich die Diskrepanz zwischen erwartetem und gemessenem Ausbreitungswinkel erklären, indem man schließt, daß die Wellenrichtung in der Tat von der Abstrahlrichtung des Interdigitalwandlers lokal abweicht. Daß die Kante des Goldfilms oder Stellen des Goldfilms mit erhöhter Schichtdicke das Wellenfeld stören können, wurde durch Behme mit dem Rasterkraftmikroskop nachgewiesen [94]. Ein weiterer möglicher Grund für die ungewöhnliche SAW-Ausbreitungsrichtung sind Merkmale des gemessenen Phasenbildes, die nicht von der Theorie des SAW-STM-Signals der ko-

rugierten Oberfläche beschrieben werden. Sie können wie zum Beispiel Artefakte an Stellen mit besonders großer Oberflächenneigung sein. Eine solche Stelle besteht an den rechten Kanten der kleinen Goldkörner in Abb. 26 (j). Solche nicht-statistischen Merkmale, die von der Theorie nicht erfaßt werden, verfälschen das Fehlerfeld des Phasenkorrelationsfehlers.

7.4.2 Der Einfluß der Wellenausbreitungsrichtung auf die Phase des SAW-STM-Signals

Im nun vorzustellenden Experiment wird der Einfluß der Wellenausbreitungsrichtung auf das Phasenbild demonstriert. Dabei wurde ausgenutzt, daß der Probenchip über zwei in entgegengesetzte Richtungen abstrahlende Interdigitalwandler verfügt, daß also die Ausbreitungsrichtung der SAW durch Umschalten auf den anderen Interdigitalwandler umgekehrt

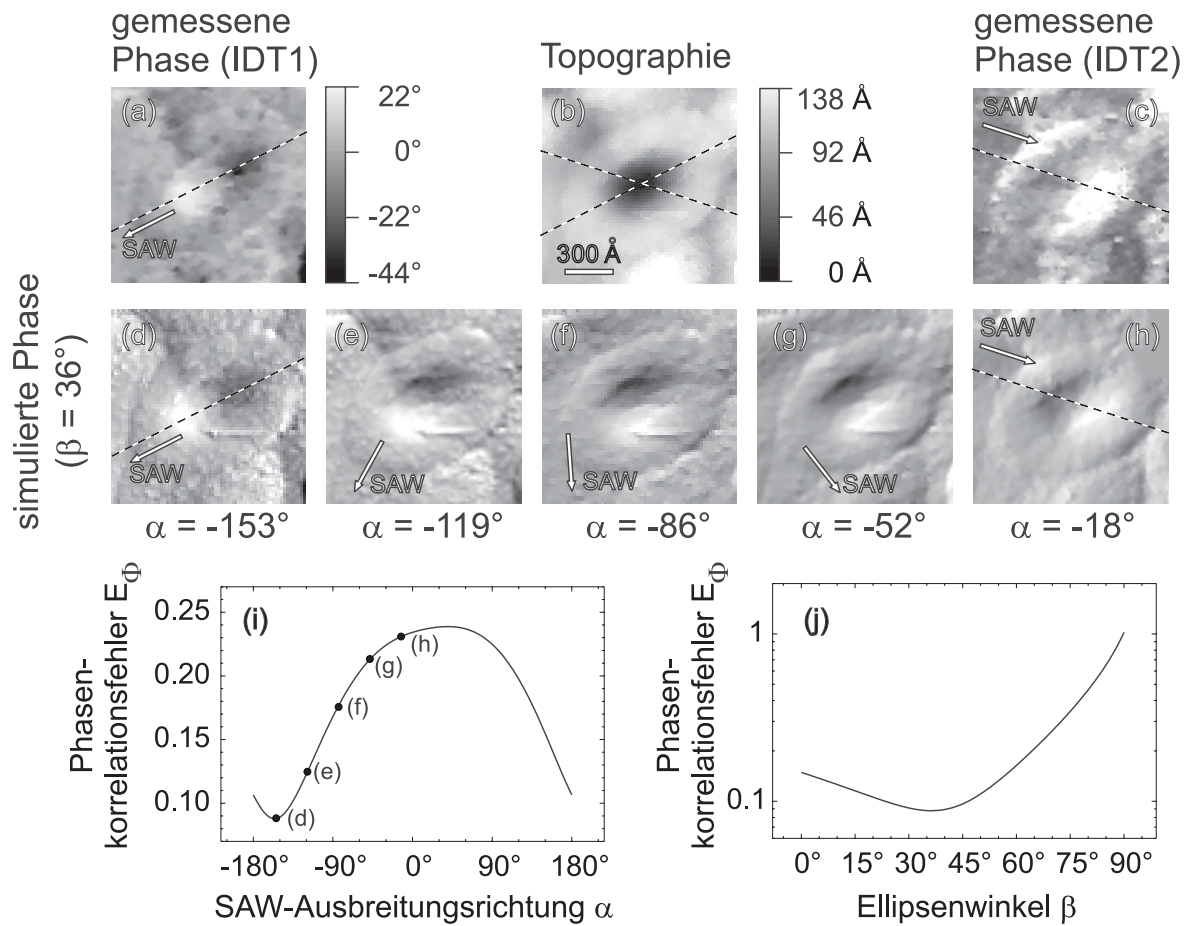


Figure 7.14: Die Abhängigkeit der Phase von der Wellenausbreitungsrichtung. Die in (a) und (c) dargestellten Phasenbilder wurden bei in unterschiedliche Richtungen laufenden SAW gemessen, indem nacheinander die beiden Interdigitalwandler des Probenchips betrieben wurden. Die Richtungsabhängigkeit des Phasenkontrasts wird einerseits in diesen Messungen deutlich, andererseits aber auch an den Simulationen (d) bis (h) für verschiedene Winkel im Bereich zwischen den beiden gemessenen Wellenausbreitungsrichtungen. (i) und (j) sind die Profile durch das Fehlerfeld am Ort seines Minimums.

werden kann. Die Meßparameter sind im wesentlichen mit denen der oben diskutierten Messung identisch. Wie in der Abb. 7.14 (b) zu erkennen ist, hat die betrachtete Goldoberfläche die Form einer Grube, die von einem ovalen Ring umschlossen ist. Die Abbildungen 7.14 (a) und (c) zeigen die gemessene Phase für den horizontal nach links (IDT1) bzw. horizontal nach rechts (IDT2) abstrahlenden Interdigitalwandler. Die Abhängigkeit von der Wellenausbreitungsrichtung ist deutlich zu erkennen. Zur Bestimmung der Parameter α_{opt} und β_{opt} wurden nach einer Glättung der gemessenen Topographie mit einer Breite $a = 18 \text{ \AA}$ des Glättungsprofils die Fehlerfelder für die beiden Interdigitalwandler IDT1 und IDT2 berechnet. Dies lieferte einen Ellipsenwinkel von $\beta_{opt} = 36^\circ$ sowie $\alpha_{opt, IDT1} = -153^\circ$ und $\alpha_{opt, IDT2} = -18^\circ$. Diese Ausbreitungsrichtungen sind in der Abbildung 7.14 als schraffierte Linien eingezeichnet. Die Profile durch das Minimum des Fehlerfeldes für die nach links laufende Welle sind in der Abb. 7.14 (i) und (j) dargestellt. Wie in Abb. 7.14 (d) und (a) deutlich zu erkennen ist, ist der Kontrast der simulierten und der gemessenen Phase in Richtung $\alpha_{opt, IDT1} = -153^\circ$ der SAW am stärksten. Dies gilt analog auch für die Phase, wenn der nach links abstrahlende IDT aktiv ist (Abb. 7.14 (h) und (c)). Die Simulationen (e), (f) und (g) zeigen die Drehung der Richtung des maximalen Phasenkontrasts, wenn α schrittweise von -153° bis zu -18° gedreht wird. Dieses Experiment und die mit ihm verbundene Simulation beweisen, daß der Einfluß der SAW-Ausbreitungsrichtung auf das Phasenbild von der Theorie des SAW-STM-Signals auf der korrigierten Oberfläche korrekt beschrieben wird. Wie schon in der im Abschnitt 7.4.1 diskutierten Messung muß aber kritisch bemerkt werden, daß die anhand des Fehlerfeldes ermittel-

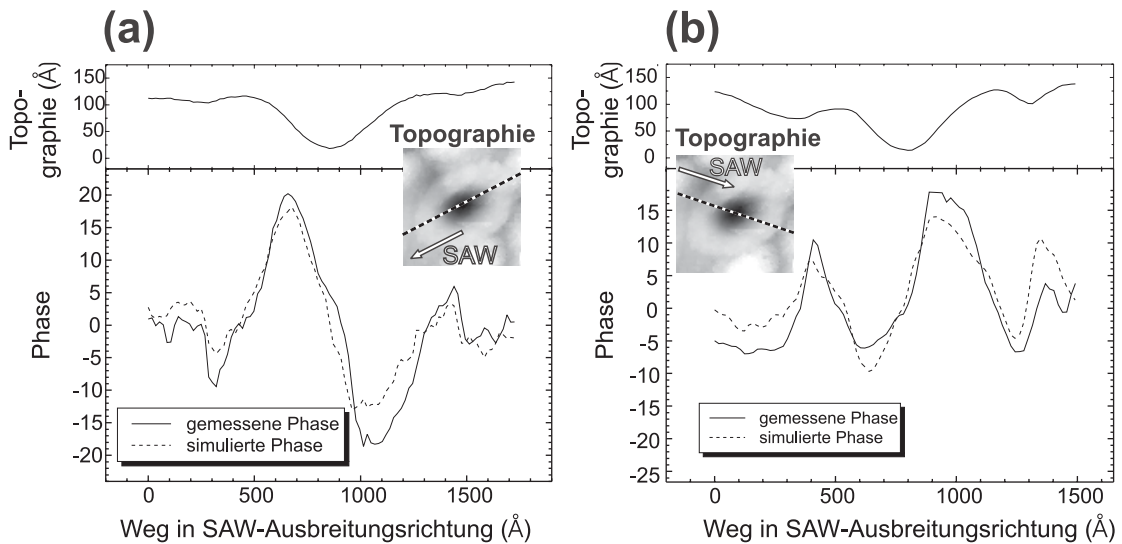


Figure 7.15: Der Zusammenhang zwischen Phase und Topographie. Die dargestellten Profile vergleichen die Topographie, die gemessene und die für die optimale Wellenausbreitungsrichtung und den optimalen Ellipsenwinkel simulierte Phase. Die gestrichelten Linien verlaufen in Ausbreitungsrichtung der SAW und sind der Pfad, entlang derer die Profile aufgetragen werden. In (a) ist der nach links und in (b) der nach rechts abstrahlende Interdigitalwandler aktiv. Die Phasenprofile bestätigen die Vorhersage der Theorie des SAW-STM-Signals auf der korrigierten Oberfläche, daß sich die Phase qualitativ wie die Ableitung der Topographie verhält.

ten SAW-Ausbreitungsrichtungen nicht mit den Abstrahlrichtungen der Interdigitalwandler zusammenfallen. Zu diesem Punkt gelten auch hier die oben angestellten Überlegungen.

Um den mathematischen Zusammenhang zwischen der Topographie und der Phase zu untersuchen, werden nun Profile der Phase und der Topographie entlang der Wellenausbreitungsrichtung betrachtet. Abb. 7.15 (a) und (b) stellen diese Profile entlang der im Topographiebild eingezeichneten gestrichelten Linien dar. Dabei bezieht sich (a) auf den nach links und (b) auf den nach rechts abstrahlenden Interdigitalwandler. In den Topographieprofilen ist die von einem Ring umschlossene Grube deutlich zu erkennen. Die Phasenprofile machen deutlich, wie gut die Übereinstimmung zwischen gemessener und für die optimalen Parameter α_{opt} und β_{opt} simulierter Phase ist. Die Gleichung 4.54 der Theorie des SAW-STM-Signals auf der korrigierten Oberfläche sagt voraus, daß die Phase monoton mit der Ableitung der Topographie in Wellenausbreitungsrichtung ansteigt und an Stellen verschwindender Ableitung gleich Null ist. Genau dieses Verhalten läßt sich an den beiden in Abb. 7.15 (a) und (b) dargestellten gemessenen Phasenprofilen erkennen: Das Phasenprofil hat Nulldurchgänge an lokalen Extrema des Topographieprofils, und maximale Phasenwerte werden an Stellen maximaler Ableitung angenommen. Der hier ausgewertete SAW-STM-Scan bestätigt also in sehr zufriedenstellender Weise die Aussagen der Theorie des SAW-STM-Signals auf der korrigierten Oberfläche über die Phase.

7.4.3 Die Abbildung monoatomarer Stufen mit den UHV-SAW-STM

Im Rahmen dieser Arbeit ist es gelungen, mit dem UHV-SAW-STM monoatomare Stufen einer Au(111)-Oberfläche in Topographie, Amplitude und Phase abzubilden. Auch wenn sich die nun vorzustellende Messung einer quantitativen Auswertung entzieht, demonstriert sie das Auflösungsvermögen des UHV-SAW-STM, das bis in den Bereich atomarer Abstände reicht. Die Messung wurde bei einem Tunnelstrom von 1 nA, einer Tunnelspannung von 50 mV und einer Tunnelspannungsmodulation von 40 mV durchgeführt. Der Interdigitalwandler wurde bei der Frequenz $f_{SAW} = 39.92$ MHz und einem IDT-HF-Signal von 200 mV betrieben. Die Differenzfrequenz zwischen SAW und Tunnelspannungsmodulation betrug 100 kHz, die Zeitkonstante des Lock-In-Verstärkers 5 ms.

Sowohl in der Topographie als auch in der Amplitude und in der Phase sind die monoatomaren Stufen deutlich zu erkennen (Abb. 7.16). Sie sind von Terrassen einer Breite von ungefähr 20 Å getrennt. Auffällig ist, daß die Stufenkanten in der Topographie ausgefranst sind. Dies ist darauf zurückzuführen, daß die Atome an der Stufenkante weniger Bindungspartner als ein Atom auf einer Terrasse haben und somit eine erhöhte Beweglichkeit aufweisen. [95] Diese Positionen an den Stufenkanten werden auch als Kink-Position bezeichnet. Der exakte Verlauf der Stufenkante ändert sich während der Messung also andauernd, während sich gleichzeitig diese sehr mobilen Atome auf den Terrassen bewegen. Die Lage der Maxima und Minima der Phase und der Amplitude relativ zur Stufenkante entspricht nicht der theoretischen Erwartung. Die Theorie des SAW-STM-Signals auf der korrigierten Oberfläche läßt erwarten,

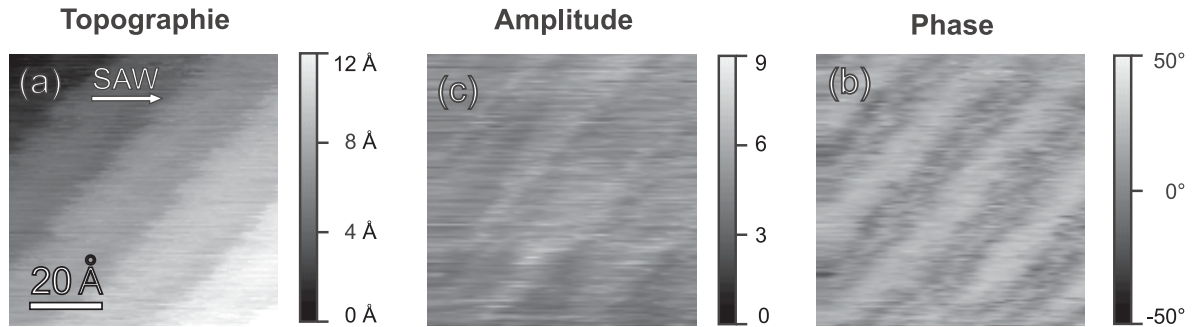


Figure 7.16: Monoatomare Stufen auf eine Au(111)-Oberfläche. Sowohl das Amplituden- (b) als auch das Phasenbild (c) weisen an den Stufenkanten deutliche Kontraste auf. Die Stufenkante ist nicht scharf in der Topographie (a) abgebildet, weil sie aus Atomen besteht, die nicht dauerhaft an die Kante gebunden sind. Diese Messung demonstriert das Auflösungsvermögen des UHV-SAW-STM bis zu atomaren Abständen.

daß die Amplitude auf den Terrassen und die Phase an den Stufenkanten maximal ist. Dies ist jedoch nicht der Fall. Verwirrenderweise sind im Phasenbild schmale Linien zu erkennen, die ein lokales Maximum bilden und parallel zu den Stufenkanten verlaufen. Für diese Diskrepanz mag einerseits die Tatsache verantwortlich sein, daß die Tunnelbedingungen durch die beweglichen Atome der Stufenkanten beeinträchtigt werden. Andererseits muß beachtet werden, daß die Höhe der Stufenkanten in der Größenordnung der am Tunneln beteiligten Fläche der Spitze liegt. Werden STM-Scans an größeren Gold-Körnern aufgenommen, dann kann die geometrische Struktur der Spitze eher vernachlässigt werden, als wenn die gescannten Oberflächendetails atomare Größenordnungen haben. Die Theorie des SAW-STM-Signals auf der korrigierten Oberfläche ersetzt die Spitze aber durch eine punktförmige Elektrode. Es ist fraglich, ob diese Vereinfachung noch berechtigt ist, wenn die abgebildeten Topographie-Merkmale, hier die Stufenkanten, in die Größenordnung atomarer Abstände kommen. Weist der Apex der Spitze etwa ein nicht rotationssymmetrisches Tunnelverhalten auf, ist es schwer vorherzusehen, welchen Einfluß dies auf die Abbildung der Amplitude und der Phase hat. Eine genauere Betrachtung dieser Problematik wird durch eine größere Anzahl vergleichbarer hochauflösender Messungen in Zukunft möglich sein.

7.4.4 Die Simulation der Amplitude des SAW-STM-Signals

Während bei den bisher vorgestellten Messungen die Auswertung der Phasenbilder im Vordergrund stand und sehr zufriedenstellende Ergebnisse lieferte, soll nun letztlich das Augenmerk auf die Amplitudenbilder gerichtet werden. Es stellt sich dabei die Frage, wie weit simulierte Amplitudenbilder mit den gemessenen übereinstimmen und ob sie es wie die Phasenbilder ermöglichen, den Ellipsenwinkel und die Wellenausbreitungsrichtung experimentell zu bestimmen. Bei der hier vorzustellenden Messung wurde der Interdigitalwandler bei der dritten Harmonischen $f_{SAW} = 120$ MHz betrieben, bei der, wie im Abschnitt 7.2.2 belegt, das

SAW-STM ohne wesentliche Einbußen in der Qualität des SAW-STM-Signals betrieben werden kann. Die in Abb. 7.17 vorgestellte Messung wurde bei einem Tunnelstrom von 2 nA, einer Tunnelspannung von 30 mV und einer Tunnelspannungsmodulation von 20 mV durchgeführt. Die Welle wurde mit einer Amplitude des HF-IDT-Signals von 200 mV angeregt, ihre Frequenz war gegenüber der Tunnelspannungsmodulation um 70 kHz verschoben.

Wie im Topographiebild Abb. 7.17 (a) zu erkennen ist, befindet sich im Scanbereich eine Anhäufung von Goldkörnern. Die Struktur der Gebiete der Oberfläche, die die Goldkörner umgibt, konnte nicht detailliert aufgelöst werden. Es scheint sich hier weder um Terrassen noch um deutlich abbildbare Goldkörner zu handeln. Die gemessenen Bilder der Phase und der Amplitude (Abb. 7.17 (b) und (c)) weisen einen deutlichen mit der Oberflächengestalt korrelierenden Kontrast auf dem Gebiet der Körner auf. Außerhalb der Körner sind beide Signale allerdings verrauscht. Dies legt die Vermutung nahe, daß auf diesen Regionen die Tunnelbedingungen von diffundierenden Atomen oder anderem beeinträchtigt werden. Kurios ist auch, daß die Amplitude auf der diffus abgebildeten Region in der linken oberen Ecke des Bildes hoch und in der rechten unteren niedrig ist, obwohl beide Gebiete in der Topographie keine wesentlichen Unterschiede aufweisen. Dies legt die Vermutung nahe, daß es einen Mechanismus gibt, der die Amplitude beeinflusst und nicht Teil der Theorie des SAW-STM-Signals auf der korrigierten Oberfläche ist. Hier scheint die Amplitude sensibel auf die vermutlich vorliegenden Adsorbate der Goldoberfläche zu reagieren, obwohl die Topographie, die vom DC-Anteil des Tunnelstromes geprägt ist, dies nicht tut. Bei einer genaueren Analyse dieser Problematik müßte beachtet werden, daß, wie von Meepagala et al. [96] nachgewiesen werden konnte, Adsorbate auf die Kraft zwischen Spitze und Probe und damit auf eine lokale Verformung der Probe am Ort des Tunnelns einen Einfluß haben.

Mit dem im Rahmen dieser Arbeit erstellten Programm "numerical_amp_phase" wurden auf Grundlage des Topographiebildes Amplitudenbilder berechnet, wobei eine Wellenamplitude von 1 Å angenommen wurde. Das Programm berechnet auf Basis der Theorie des SAW-STM-Signals auf der korrigierten Oberfläche die Amplitude d_1 der Abstandsmodulation. Der Versuch, analog zur Auswertung der Phasenbilder anhand der Amplitude den Ellipsenwinkel und die Wellenausbreitungsrichtung zu bestimmen, mißlang: Das errechnete Fehlerfeld des in Abschnitt 4.4.2 definierten Amplitudenkorrelationsfehlers hatte zwar ein deutliches Minimum, dieses lag aber nicht an einer physikalisch sinnvollen Stelle. Daher wurden die Parameter α und β variiert und durch vergleichendes Hinsehen beurteilt, bei welchen α und β die Übereinstimmung zwischen gemessenem und simuliertem Amplitudenbild optimal ist. Auf diese Weise wurden die Wellenausbreitungsrichtung $\alpha = 0^\circ$ und der Ellipsenwinkel $\beta = 35^\circ$ bestimmt. Das für diese Werte simulierte Amplitudenbild ist in (Abb. 7.17 (d)) dargestellt. Da sowohl bei der Messung als auch bei der Simulation der Amplitude nur arbiträre Einheiten verwendet werden, wurde die simulierte Amplitude mit einem Faktor multipliziert, so daß das simulierte und das gemessene Amplitudenbild in derselben Grauwertskalierung verglichen werden können. Auf den Goldkörnern des Bildausschnittes gibt die Simulation qualitativ im wesentlichen die Struktur der gemessenen Amplitude wieder, wenn auch der

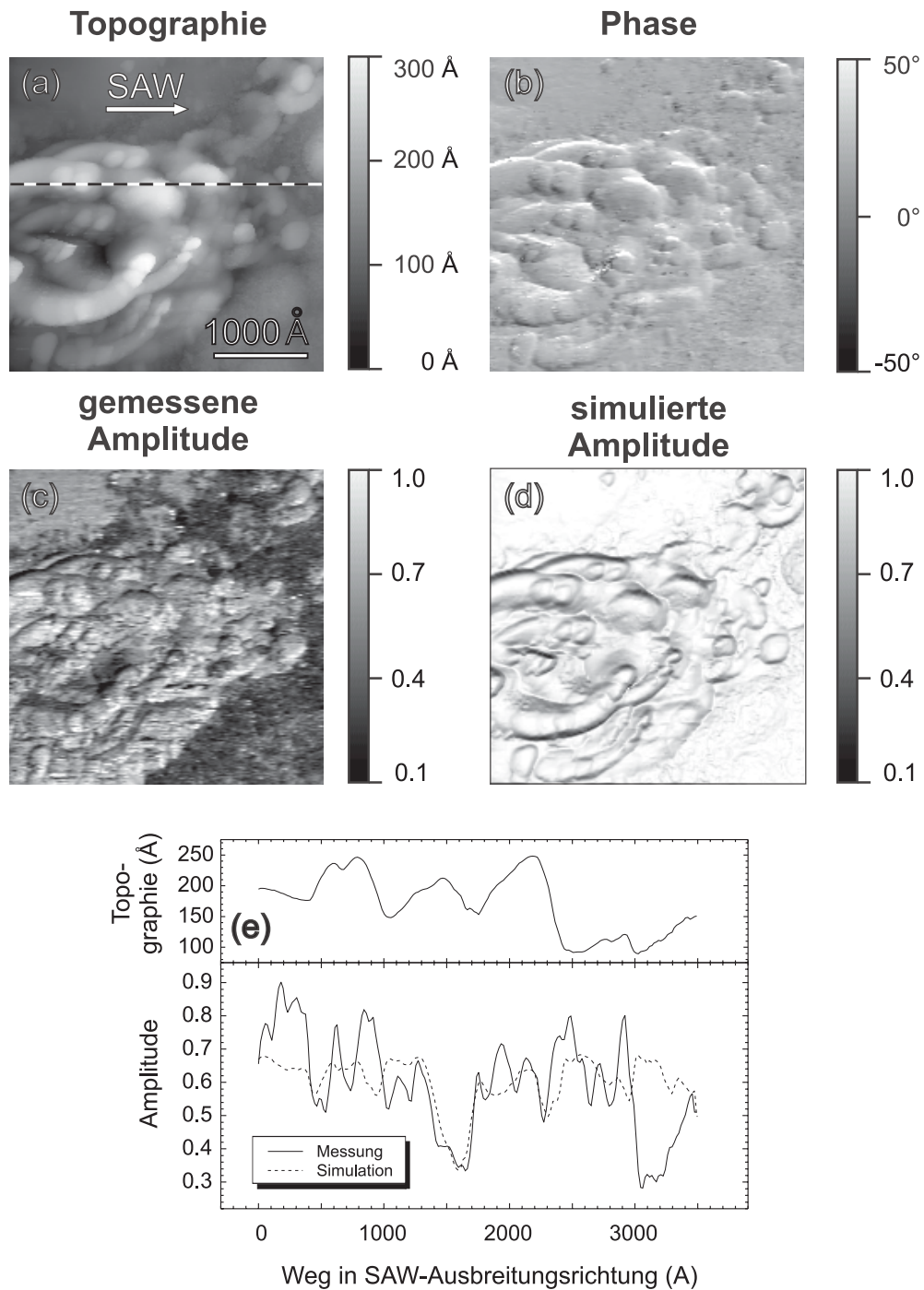


Figure 7.17: Vergleich zwischen Messung und der Simulation der SAW-STM-Amplitude auf Goldkörnern. Der Kontrast der gemessenen Bilder der Phase (b) und der Amplitude (c) gibt die von Goldkörnern bestimmte Topographie der Probenoberfläche (a) wieder. Die simulierte Amplitude stimmt auf dem von Goldkörnern belegten Gebiet des Bildausschnittes qualitativ gut mit der gemessenen überein. Das Amplitudenprofil (e) entlang der gestrichelten Linie in (a) zeigt, daß einzelne Details der gemessenen Amplitude von der Simulation in guter Übereinstimmung nachgezeichnet werden.

gemessene Amplitudenkontrast an mehreren Stellen nicht reproduziert werden konnte. Die Abb. 7.17 (e) stellt die Topographie, die gemessene und die simulierte Amplitude im Profil entlang der gestrichelten Linie in Abb. 7.17 (a) dar. Gemäß der Orientierung des Interdigitalwandlers ist zu erwarten, daß die Welle horizontal von links nach rechts den Bildausschnitt durchläuft; die dargestellten Profile verlaufen also in der Wellenausbreitungsrichtung. Die qualitative Übereinstimmung zwischen simuliertem und gemessenem Amplitudenprofil ist befriedigend: Auch wenn die Simulation nicht alle Details der Messung reproduziert, werden doch die groben Strukturen des gemessenen Amplitudenprofils von der Simulation wiedergegeben. Ähnlich wie bei der Phase einen Zusammenhang zwischen den beiden Amplitudenprofilen und dem Topographieprofil zu erkennen, ist schwer möglich. Dies ist darin begründet, daß gemäß der Theorie des SAW-STM-Signals auf der korrigierten Oberfläche die Amplitude sowohl von der Ableitung der Oberfläche in Richtung der Wellenausbreitung als auch von der Ableitung senkrecht zu ihr abhängt.

Die Diskrepanz zwischen Messung und Simulation ist darin begründet, daß hier als simulierte Amplitude die Amplitude d_1 der Abstandsmodulation verwendet wird. Wie aber im Abschnitt 7.3.1 anhand der Abb. 7.6 diskutiert wurde, ist die Amplitude A des SAW-STM-Signals nicht proportional zu d_1 . Würde jedoch die Rechtskrümmung der Kurve $A(d_1)$ berücksichtigt, wäre eine noch bessere Übereinstimmung mit der Messung zu erwarten. Zu diesem Zweck könnten in späteren Arbeiten folgende Schritte unternommen werden: Mit Hilfe der in Abschnitt 7.3.1 erfolgten Absolutkalibrierung der Amplitude der Abstandsmodulation muß die Amplitude des IDT-HF-Signals in eine Länge u_3 der senkrechten Halbachse der Oszillationsellipse umgerechnet werden. Mit diesem u_3 kann dann die Amplitude d_1 der Abstandsmodulation in Å kalibriert simuliert werden. Um aus d_1 die Amplitude a des SAW-STM-Signals zu berechnen, muß die aus den Experimenten bekannte Abhängigkeit $A(d_1, V_0, V_1, I_0)$ hergenommen werden. Es ist zu erwarten, daß dieses Amplitudenbild, bei dessen Simulation die Rechtskrümmung der Kurve $A(d_1)$ berücksichtigt wurde, besser mit der Messung übereinstimmt als die oben vorgestellte Simulation. Dennoch ist festzustellen, daß auch der in dieser Arbeit entwickelte Algorithmus zur Simulation der Amplitude Ergebnisse liefert, die eine befriedigende Übereinstimmung mit den gemessenen Amplitudenbildern aufweisen. Auch dies bestätigt die Aussagefähigkeit der Theorie des SAW-STM-Signals auf der korrigierten Oberfläche.

8 Zusammenfassung und Ausblick

Diese Arbeit befaßte sich mit der SAW-STM-Methode, einer Abwandlung der Rastertunnelmikroskopie (STM¹) zur hochauflösenden Abbildung akustischer Oberflächenwellen (SAW²), die am Paul-Drude-Institut entwickelt wurde. Die Untersuchung von SAWs ist nicht nur von großem wissenschaftlichen sondern auch von wirtschaftlichem Interesse, weil Oberflächenwellenbauelemente kommerziell in großem Maßstab zur Signalverarbeitung in der Telekommunikation verwendet werden. Da bei diesem Wellentyp die Bewegungsenergie auf die Oberfläche konzentriert ist, leisten SAWs einen sehr guten Dienst als Sonde für die Untersuchung oberflächennaher Strukturen in Festkörpern, insbesondere in Schichtsystemen. Durch vielfältige Wechselwirkungsmechanismen können sie somit elastische, elektronische und gar magnetische Eigenschaften dünner Filme sichtbar machen. Mit dem rasanten Fortschritt in der Nanotechnologie besteht zunehmender Bedarf nach Charakterisierungsmethoden für Strukturen wie Quantenpunkte und Quantendrähte, die wegen ihrer geringen Abmessungen für optische Methoden unzugänglich sind. Die SAW-STM-Technik ist ein vielversprechender Ansatz, Abbildungen lokaler elastischer Eigenschaften mit der benötigten Nanometer-Auflösung zu erzeugen. Wie in der Einleitung dargelegt, ist das SAW-Rastertunnelmikroskop (SAW-STM) optischen und anderen Rastersondenmethoden, die akustische Oberflächenwellen abbilden, überlegen, weil es die oszillatorische Bewegung der wellentragenden Oberfläche komplett ausmessen kann.

Das Meßprinzip des SAW-STM zur Detektion der akustischen Oberflächenwellen beruht auf der Modulation des Tunnelabstandes und der hieraus resultierenden Modulation des Tunnelstroms durch die oszillatorische Bewegung der Probenoberfläche. Das Problem, daß die Frequenz der SAW und somit auch der Tunnelstrommodulation die Bandbreite der Abstandsregelung des STM und seines Signalfades weit überschreitet, wird durch eine gleichzeitige Modulation der Tunnelspannung bei einer leicht verschobenen Frequenz gelöst. In diesem Heterodyn-Verfahren werden somit die Modulation des Tunnelabstandes und der Tunnelspannung an der nicht-linearen Abstands-Spannungs-Charakteristik des Tunnelüberganges gemischt. Hierbei entsteht ein Differenzfrequenz-Signal, dessen Phase gleich der Phase der Abstandsmodulation des Tunnelübergangs ist. Die Amplitude dieses SAW-STM-Signals ist für geringe Wellenamplituden proportional zur Amplitude der Abstandsmodulation. Im SAW-STM-Experiment wird das Rastertunnelmikroskop im Constant-Current-Modus betrieben und zusätzlich zur Topographie die Amplitude und die Phase des SAW-STM-Signals aufgezeichnet und als Falschfarbenbild dargestellt. Der Kontrast wird dabei sowohl von dem Oberflächenprofil der Probe als auch von ihrer Oszillationsbahn bestimmt.

Mit dieser Arbeit wurde die SAW-STM-Methode unter folgenden Aspekten entscheidend weiterentwickelt: Durch den Umbau eines im Ultrahochvakuum (UHV) arbeitenden Rastertunnelmikroskops zum UHV-SAW-STM wurde das Spektrum der untersuchbaren Materialien

¹engl. scanning tunneling microscopy

²engl. surface acoustic wave

um reaktive Metalle und Halbleiter erweitert. Auch konnte hierdurch die Signalstabilität so verbessert werden, daß im Gegensatz zum Luft-SAW-STM die Meßdaten quantitativ ausgewertet werden konnten. Dies ermöglichte die systematische Untersuchung der Abhängigkeit des Meßsignals, dem SAW-STM-Signal, von den Meßparametern und die vollständige Vermessung der Oszillationsellipse. Hierbei kam ein umfangreiches Softwarepaket zum Einsatz, das im Rahmen dieser Arbeit eigens für die Auswertung von SAW-STM-Daten erstellt wurde. Zudem wurde eine Theorie erarbeitet, die das Meßsignal in sehr guter Übereinstimmung mit den gemessenen funktionalen Abhängigkeiten beschreibt. So erhielt die SAW-STM-Methode ein experimentell überprüftes theoretisches Fundament.

Beim Umbau des vorhandenen kommerziellen Rastertunnelmikroskops zum UHV-SAW-STM wurden mehrere konstruktive Aufgaben gelöst. Im Gegensatz zum konventionellen STM müssen zwischen der Probe und dem UHV-SAW-STM fünf elektrische Kontakte geschlossen werden. Um gleichzeitig einen von festen Kabeln ungehinderten Transfer der Probe zwischen der Schleuse, der Bedampfungseinrichtung und dem STM zu gewährleisten, ist ein Kontaktfedermechanismus in die Probenaufnahme des STM integriert worden. Erst hierdurch wird es möglich, unter UHV-Bedingungen sowohl die Probe zu präparieren als auch an ihr das SAW-STM-Experiment durchzuführen. Zur Einkopplung der Hochfrequenz-Signale in die UHV-Kammer wurde ein Signalpfad aufgebaut, der größtenteils aus impedanzangepaßten, erdfrei coaxial abgeschirmten Kabeln und Durchführungen besteht und gleichzeitig die Schwingungsisolation des STM nicht beeinträchtigt. Weiterhin wurde die UHV-Anlage um eine Bedampfungseinrichtung einschließlich eines kommerziellen Elektronenstrahlverdampfers erweitert, mit der unter Kontrolle der Substrattemperatur und der Wachstumsrate der Probenfilm präpariert wird. Eine Maskenkonstruktion verhindert dabei die Bedampfung der auf dem Probenchip bereits vorhandenen Interdigitalwandler. Die erfolgte Installation stärkerer Pumpen und einer eigens entwickelten elektronischen Steuerung zum Ausheizen der UHV-Anlage tragen zusätzlich zum effizienten Betrieb des UHV-SAW-STM bei. Die erhöhte Signalstabilität, die Dynamik und die Bandbreite des UHV-SAW-STM demonstrieren den Erfolg des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Gerätes: Es konnten akustische Oberflächenwellen einer Amplitude von 0.001 \AA bis 1 \AA angeregt und detektiert werden. Auch wurde der Betrieb bei einer SAW-Frequenz von 360 MHz erfolgreich demonstriert. Diese Frequenz ist nur eine untere Grenze für die Bandbreite des UHV-SAW-STM; sobald höherfrequente Proben zur Verfügung stehen, wird die erfolgte Abschätzung der Bandbreite auf mindestens 1 GHz experimentell überprüft werden können. Anhand der groben Übereinstimmung zwischen dem Frequenzgang des SAW-STM-Signals und der Übertragungscharakteristik der Interdigitalwandler konnte bewiesen werden, daß das SAW-STM-Signal auf die wellenbedingte Modulation des Tunnelabstandes zurückzuführen ist. Partiiell an den Interdigitalwandlern reflektierte SAWs wurden anhand der Feinstruktur der Frequenzgänge nachgewiesen.

Zur Auswertung der SAW-STM-Messungen wurde ein umfangreiches Software-Paket erstellt,

das über die in kommerziellen Programmen üblichen Funktionen zur Darstellung und Bearbeitung von STM-Daten verfügt, darüber hinaus aber SAW-STM-spezifische Funktionen einschließt. Die Software umfaßt unter anderem die Darstellung der Daten der SAW-STM-Scans als Falschfarbenbilder und als Profile entlang beliebiger Linien, den Datenexport als Spreadsheet und als Graphik, die automatische Eliminierung von Ausreißern, die Glättung eventuell verrauschter Bilder, die Untergrundsubtraktion von Topographiebildern, die Verschiebung des Nullpunktes bei Phasenbildern. Durch die Unterdrückung ausgewählter Komponenten im fouriertransformierten Bild können Messungen atomar aufgelöster Oberflächen bearbeitet werden. Damit Topographie-, Amplituden- und Phasenbilder miteinander verglichen werden können, steht eine Routine zur Kompensation der durch die Trägheit der Messung bedingten relativen Verschiebung dieser Bilder zu Verfügung. Basierend auf der Theorie des SAW-STM-Signals auf der korrigierten Oberfläche können anhand gemessener oder durch Funktionsgleichungen definierter Topographien SAW-STM-Bilder simuliert werden. Auch steht eine Programmkomponente zur Verfügung, mit der durch den quantitativen Vergleich gemessener und simulierter SAW-STM-Bilder die Auslenkungskomponenten der akustischen Oberflächenwelle bestimmt werden können. Durch die Möglichkeit, diesen Vergleich auf einen zu definierenden Ausschnitt des Scanbereichs zu beschränken, können somit in zukünftigen Experimenten, die bei kürzeren akustischen Wellenlängen durchgeführt werden, elastische Inhomogenitäten innerhalb des Scanbereichs gesucht werden.

Als Probensystem wurde bei allen Experimenten ein LiNbO_3 -Kristall im YZ-Schnitt verwendet, auf dem zwei Interdigitalwandler zwei in entgegengesetzter Richtung laufende Oberflächenwellen vom Rayleigh-Typ anregen können. Um die SAW-STM-Methode auf ein sicheres Fundament zu stellen, wurde erstmals systematisch die Abhängigkeit des SAW-STM-Signals von den Meßparametern experimentell untersucht. Diese sind die Tunnelspannung, die Amplitude der Tunnelspannungsmodulation, der von der Abstandsregelung des STM konstant gehaltene mittlere Tunnelstrom und die Amplitude des IDT-HF-Signals, das am Interdigitalwandler die akustische Oberflächenwelle anregt. Insbesondere die Abhängigkeit der Amplitude des SAW-STM-Signals von der Wellenamplitude entsprach nicht dem Verlauf, der von der Theorie von Fröhlich et al. vorhergesagt wurde. Im Rahmen dieser Arbeit wurde diese Theorie erweitert, indem der Einfluß der Abstandsmodulation auf den mittleren Tunnelstrom und, sofern das STM im Constant-Current-Modus betrieben wird, auf den mittleren Tunnelabstand berücksichtigt wurde. So konnten Gleichungen gefunden werden, die implizit die Abhängigkeit der Amplitude des SAW-STM-Signals und des mittleren Tunnelabstandes von den oben aufgezählten Meßparametern beschreiben. Da diese Gleichungen in keine analytisch geschlossene Form gebracht werden konnten, wurden die expliziten funktionalen Abhängigkeiten numerisch ermittelt und anschließend ausführlich diskutiert. Diese Theorie des SAW-STM-Signals im Constant-Current-Modus kommt unter anderem zu dem kuriosen Ergebnis, daß sich der während eines Oszillationszyklus auftretende minimale Tunnelabstand mit zunehmender Wellenamplitude asymptotisch der Null nähert. Die Existenz dieses asymptotischen Tip-Crashes konnte im Experiment anhand der zunehmenden Instabilität des mit-

tlernen Tunnelstroms bei sehr hohen Wellenamplituden nachgewiesen werden.

Ebenfalls beschreibt die Theorie des SAW-STM-Signals im Constant-Current-Modus die gemessene Abhängigkeit der Signalamplitude von der Amplitude des die SAW anregenden IDT-HF-Signals in sehr guter Übereinstimmung. Es gelang, anhand dieser gemessenen Abhängigkeit die vertikale Auslenkungskomponente der akustischen Oberflächenwelle in absoluter Kalibrierung zu bestimmen. Auch die gemessene Abhängigkeit der Signalamplitude vom mittleren Tunnelstrom steht im Einklang mit der theoretischen Erwartung. Die Abhängigkeit von der mittleren Tunnelspannung und von der Amplitude der Tunnelspannungsmodulation weicht geringfügig, aber in systematischer Weise vom erwarteten Verlauf ab. Die Unsicherheit in der Kenntnis der Austrittsarbeit des Goldfilms konnte als Ursache hierfür ausgeschlossen werden; dieses Ergebnis weist auf eine Abweichung vom exakt ohmschen Verhalten des Tunnelübergangs hin. Bis auf diese Einschränkung bestätigten die Messungen die Theorie des SAW-STM-Signals im Constant-Current-Modus in überzeugender Weise.

Um den Ellipsenwinkel zu bestimmen, der die Exzentrizität der Oszillationsellipse der Rayleighwelle parametrisiert, wurden mit dem UHV-SAW-STM Bilder der Topographie, der Amplitude und der Phase des SAW-STM-Signals aufgenommen und mit Simulationen verglichen. Die von Fröhlich et al. entwickelte Theorie des SAW-STM-Signals beschreibt die Amplitude und die Phase des SAW-STM-Signals als Funktion der Neigung der Probenoberfläche und des Ellipsenwinkels. Diese Theorie wird in dieser Arbeit ausführlich diskutiert, ihr Herleitungsweg wird verkürzt, und es wird eine geometrische Anschauung zur Entstehung des Kontrasts der Phasenbilder geliefert. Basierend auf dieser Theorie wurden mit der oben beschriebenen Software anhand der gemessenen Topographie Amplituden- und Phasenbilder simuliert und quantitativ mit den gemessenen Amplituden- und Phasenbildern verglichen. Hierfür wurden die in dieser Arbeit definierten Korrelationsfehler der Amplitude und der Phase verwendet, die die Abweichung zweier Amplituden- bzw. Phasenbilder bemessen. Es wurden Definitionen entwickelt und mathematisch begründet, die die Unkenntnis der Eichkonstanten bei der Amplituden- und bei der Phasenmessung berücksichtigen. Die Auftragung beider Korrelationsfehler als Funktion des für die Simulation verwendeten Ellipsenwinkels und der Ausbreitungsrichtung der SAW liefert zwei Fehlerfelder. An ihren Minima lassen sich der real im Experiment vorliegende Ellipsenwinkel und die Ausbreitungsrichtung ablesen.

Durch die Auswertung von Fehlerfeldern des Phasenkorrelationsfehlers konnte unseres Wissens zum ersten Mal der Ellipsenwinkel und damit die Exzentrizität der Oszillationsellipse der Rayleighwelle experimentell bestimmt werden. Im Rahmen des Meßfehlers von $\pm 6\%$ stimmt der Meßwert mit dem theoretisch gewonnenen Literaturwert überein. Zusammen mit der oben angeführten Messung der vertikalen Auslenkungskomponente ist es damit gelungen, die Oszillationsellipse der Rayleighwelle vollständig auszumessen. Um diesen Meßfehler des Ellipsenwinkels zu minimieren, wurde bei der Kalibrierung des lateralen Maßstabes des STM ein eigens entwickelter Algorithmus verwendet, der gegenüber der Probendrift insensitive ist. Im Minimum des Fehlerfeldes ist die Übereinstimmung des simulierten mit dem gemessenen

Phasenbild sehr gut, womit die Theorie des SAW-STM-Signals auf der korrigierten Oberfläche bestätigt werden konnte. Auch wenn die Fehlerfelder des Amplitudenkorrelationsfehlers deutliche Minima aufwiesen, gaben sie keine verlässliche Auskunft über den Ellipsenwinkel und die Ausbreitungsrichtung. Trotzdem konnte eine befriedigende quantitative Übereinstimmung zwischen gemessenen und simulierten Amplitudenbildern erzielt werden. Es wurde eine Weiterentwicklung des Algorithmus' zur Amplitudensimulation vorgeschlagen, der verbesserte Simulationsergebnisse erwarten läßt. Weiterhin konnte experimentell die Abhängigkeit des Phasenkontrasts von der Wellenausbreitungsrichtung demonstriert werden. Die nicht zu vernachlässigende Abweichung der anhand der Fehlerfelder des Phasenkorrelationsfehlers bestimmten Ausbreitungsrichtung von der Achse des Interdigitalwandlers wird auf den Einfluß der Drift und auf die Streuung der SAW an Defekten zurückgeführt. Weiterhin gelang es, monoatomare Stufen der Au(111)-Oberfläche in der Topographie, der Amplitude und der Phase abzubilden; hiermit ist gezeigt, daß das Auslösungsvermögen des UHV-SAW-STM bis in den Bereich atomarer Strukturen reicht.

Mit dieser Arbeit ist bewiesen worden, daß sich die durch akustische Oberflächenwellen hervorgerufene oszillatorische Bewegung der Oberfläche mit der SAW-STM-Methode vollständig ausmessen läßt. Es stellt sich die Frage, ob sich dieses Vermögen des SAW-STM dazu nutzen läßt, elastische Inhomogenitäten auf der Nanometerskala sichtbar zu machen. Diese sind Orte der Probe, die sich in ihren elastischen Eigenschaften von der Umgebung unterscheiden, wie etwa Versetzungen, Einschlüsse von Fremdmaterialien oder Spannungsfelder. Die Voraussetzung hierfür ist, daß durch die SAW eine deutliche Relativbewegung zwischen den Volumenelementen der Inhomogenität und ihrer Umgebung stattfindet. Dies ist erst dann der Fall, wenn die akustische Wellenlänge nicht um mehrere Größenordnungen größer als die Inhomogenität ist. Das SAW-STM müßte also bei Frequenzen von über 1 GHz betrieben werden. Es konnte demonstriert werden, daß für die Bestimmung des Ellipsenwinkels Bildausschnitte der Größe von $30 \text{ \AA} \times 30 \text{ \AA}$ ausreichen. Die Oszillationsellipse kann also so lokal vermessen werden, daß die Auflösung des Auswertungsalgorithmus' der Abbildung elastischer Inhomogenitäten nicht im Wege steht. Entscheidend für die Abbildung der Inhomogenitäten ist also die noch nicht nachgewiesene Eignung des UHV-SAW-STM für den Betrieb im GHz-Bereich. Wenn es in zukünftigen Experimenten gelingt, das UHV-SAW-STM bei entsprechend kurzen Wellenlängen zu betreiben, wird es möglich sein, mit dem SAW-STM akustische Mikroskopie an Nanostrukturen durchzuführen.

Bibliography

- [1] A. E. H. Love, *Some Problems of Geophysics* (Cambridge University Press, London, 1911).
- [2] T. Yu, L. Dresen, and H. Rüter, *J. Appl. Geophys.* **36**, 53 (1996).
- [3] L. Rayleigh, *Proc. London Math. Soc.* **17**, 4 (1885).
- [4] E. Zolotoyabko, D. Shilo, W. Sauer, E. Pernot, and J. Baruchel, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 2278 (1998).
- [5] T. Sogowa, P. Santos, S. K. Zhang, S. Eshlagi, A. D. Wieck, and K. H. Ploog, *Phys. Rev. Lett.* **87**, (2001).
- [6] M. Rotter, A. Wixforth, W. Ruile, D. Bernklau, and H. Riechert, *Appl. Phys. Lett.* **73**, 2128 (1998).
- [7] H. P. Feuerbaum, H. P. Grassl, U. Knauer, and R. Veith, *Scanning Electron Microsc.* **1**, 55 (1983).
- [8] J. P. Monchalin, *Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control*, 485 (1986).
- [9] G. C. W. Jr., S. E. McBride, R. J. Warmack, and B. V. de Sande, *Appl. Phys. Lett.* **55**, 528 (1989).
- [10] P. V. Santos, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 4002 (1999).
- [11] S. Lehtonen, J. Koskela, M. M. Salomaa, V. P. Plessky, M. Honkanen, and J. Turunen, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 142 (1999).
- [12] H. Odagawa, A. Qureshi, T. Meguro, and K. Yamanouchi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **37**, 2927 (1998).
- [13] G. Binning, H. Rohrer, C. Gerber, and E. Weibel, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 57 (1982).
- [14] R. J. Wilson, P. H. Lippel, S. Chiang, D. D. Chambliss, and V. M. Hallmark, *Ultramicroscopy* **47**, 212 (1992).
- [15] B. Binnig, C. F. Quate, and C. Gerber, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 930 (1985).
- [16] G. Meyer and N. M. Amer, *Appl. Phys. Lett.* **57**, 2089 (1990).
- [17] Y. Martin and H. K. Wickramasinghe, *Appl. Phys. Lett.* **50**, 1455 (1987).
- [18] C. C. Williams and H. K. Wickramasinghe, *Appl. Phys. Lett.* **49**, 1587 (1986).
- [19] D. R. Oliver, A. Pu, D. J. Thomson, and G. E. Bridges, *Appl. Phys. Lett.* **79**, 3729 (2001).
- [20] K. Dransfeld, *Phys. Bl.* **46**, 307 (1990).

- [21] D. W. Abraham, C. C. Williams, and H. K. Wickramasinghe, Appl. Phys. Lett. **53**, 1503 (1988).
- [22] E. P. Stoll and J. K. Gimzewski, J. Vac. Sci. Technol. B **9**, 643 (1991).
- [23] K. J. Strozewski, S. E. McBride, and J. G. C. Wetsel, Ultramicroscopy **42-44**, 388 (1992).
- [24] K. Takata, T. Hasegawa, H. Shigeyuki, and S. Hosoki, Appl. Phys. Lett. **55**, 1718 (1989).
- [25] J. Heil, J. Wesner, and W. Grill, J. Appl. Phys. **64**, 1939 (1988).
- [26] E. Chilla, T. Hesjedal, and H.-J. Fröhlich, Phys. Rev. B **55**, 15852 (1997).
- [27] G. Behme, T. Hesjedal, E. Chilla, and H.-J. Fröhlich, Appl. Phys. Lett. **73**, 882 (1998).
- [28] T. Hesjedal, E. Chilla, and H.-J. Fröhlich, Appl. Phys. Lett. **69**, 354 (1996).
- [29] W. Rohrbeck, E. Chilla, J. Riedel, and H.-J. Fröhlich, Beitr. Elektronenmikroskop. Direktabb. Oberfl. **23**, 319 (1990).
- [30] W. Rohrbeck, E. Chilla, H.-J. Fröhlich, and J. Riedel, Appl. Phys. A **52**, 344 (1991).
- [31] E. Chilla, W. Rohrbeck, H.-J. Fröhlich, R. Koch, and K. H. Rieder, Ann. Physik **3**, 21 (1994).
- [32] T. Hesjedal, E. Chilla, and H.-J. Fröhlich, J. Vac. Sci. Technol. B **15**, 1569 (1997).
- [33] J. Tersoff and D. Hamann, Phys. Rev. B **31**, 805 (1985).
- [34] J. G. Simmons, J. Appl. Phys. **34**, 1793 (1963).
- [35] E. Chilla, W. Rohrbeck, H.-J. Fröhlich, R. Koch, and K. H. Rieder, Appl. Phys. Lett. **61**, 3107 (1992).
- [36] B. A. Auld, *Acoustic Fields and Waves in Solids* (Krieger Publishing Company, Melbourne, 1990).
- [37] E. L. Adler, Ultrasonics Symposium 367 (1989).
- [38] E. L. Adler, IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control **41**, 876 (1994).
- [39] R. M. . White and F. W. Voltmer, Appl. Phys. Lett. **7**, 314 (1965).
- [40] A. Ballato, IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control **42**, 916 (1995).
- [41] R. H. Tancrell, *Principles of Surface Wave Filter Design* (Wiley, New York, 1977), Chap. 3.

- [42] M. Yamanishi, M. Ameda, K. Tsubouchi, T. Kawamura, and N. Mikoshiba, Ultrasonics Symposium Proceedings, 501 (1976).
- [43] D. E. Oates and R. A. Becker, Appl. Phys. Lett. **38**, 761 (1981).
- [44] D. W. Schindel and D. A. Hutchins, J. Acoust. Soc. Am. **97**, 1650 (1995).
- [45] D. W. Schindel, D. A. Hutchins, L. Zou, and M. Sayer, Acoustic Sensing and Imaging (Conference Publication No. 369), 7 (1993).
- [46] S. J. Davies, C. Edwards, G. S. Taylor, and S. B. Palmer, J. Phys. D: Appl. Phys. **26**, 329 (1993).
- [47] K. Yamanaka, H. Nishino, H. Cho, Y. Nagata, T. Koda, M. Inaba, A. Sato, and Y. Tsukahara, Ultrasonics Proceedings, 1211 (1994).
- [48] H. Sato, H. Ogiso, A. Yabe, and K. Yamanaka, Rev. Sci. Instrum. **70**, 4435 (1999).
- [49] H. Nishino, Y. Tsukahara, Y. Nagata, T. Koda, and K. Yamanaka, Jpn. J. Appl. Phys. **32**, 2536 (1993).
- [50] H. Cerva and W. Graeff, Phys. Stat. Sol. (a) **82**, 35 (1984).
- [51] H. Cerva and W. Graeff, Phys. Stat. Sol. (a) **87**, 507 (1985).
- [52] G. Eberharder and H. P. Feuerbaum, Appl. Phys. Lett. **37**, 698 (1980).
- [53] W. J. Tanski and N. D. Wittels, Appl. Phys. Lett. **34**, 537 (1979).
- [54] D. V. Roshchupkin, M. Brunel, R. Tucoulou, E. Bigler, and N. G. Sorokin, Appl. Phys. Lett. **64**, 164 (1994).
- [55] A. N. Alexeyev and D. V. Roshchupkin, Appl. Phys. Lett. **68**, 159 (1996).
- [56] D. V. Roshchupkin, T. Fournier, M. Brunel, O. A. Plotitsyna, and N. B. Sorokin, Appl. Phys. Lett. **60**, 2330 (1992).
- [57] A. A. Maznev, A. A. Kolomenskii, and P. Hess, Phys. Rev. Lett. **75**, 3332 (1995).
- [58] C. F. Quate and R. Lemmons, Proc. IEEE **67**, 1092 (1979).
- [59] S. Boseck, Phys. Bl. **49**, 497 (1993).
- [60] J.-I. Kushibiki and N. Chubachi, IEEE Trans. Sonics and Ultrason. **SU-32**, 189 (1985).
- [61] D. Xiang, N. N. Hsu, and G. V. Blessing, Appl. Phys. Lett. **74**, 2236 (1999).
- [62] E. Drescher-Krasicka and J. R. Willis, Nature **384**, 52 (1996).

- [63] A. G. Every and W. Sachse, Phys. Rev. B **44**, 6689 (1991).
- [64] R. E. Vines, S. Tamura, and J. P. Wolfe, Phys. Rev. Lett. **74**, 2729 (1995).
- [65] W. Rohrbeck and E. Chilla, Phys. Stat. Sol. **131**, 69 (1992).
- [66] E. Chilla, T. Hesjedal, and H.-J. Fröhlich, Phys. Rev. B **55**, 15852 (1997).
- [67] G. Behme, E. Chilla, and H.-J. Fröhlich, 1999 IEEE Ultrason. Symp. Proc., 173 (1999).
- [68] J. Tersoff, in *Scanning Tunneling Microscopy and Related Methods*, edited by R. J. Behm (Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 1990), .
- [69] C. J. Chen, J. Vac. Sci. Technol. A **9**, 44 (1991).
- [70] A. Messiah, *Quantenmechanik*, 2nd ed. (de Gruyter, Berlin, New York, 1991), Vol. 1.
- [71] N. Garcia, IBM J. Res. Develop **30**, 533 (1986).
- [72] A. A. Lucas, Europhys. News **21**, 63 (1990).
- [73] C. J. Chen, *Introduction to Scanning Tunneling Microscopy* (Oxford University Press, Oxford, 1993), p. 23.
- [74] N. D. Lang, Phys. Rev. Lett. **56**, 1164 (1986).
- [75] J. Bardeen, Phys. Rev. Lett. **6**, 57 (1961).
- [76] J. Tersoff and N. D. Lang, Phys. Rev. Lett. **65**, 1132 (1990).
- [77] X.-W. Liu and A. P. Stamp, J. Vac. Sci. Technol. B **12**, 2189 (1994).
- [78] W. Sauer, M. Streibl, T. H. Metzger, A. G. C. Haubrich, S. Manus, A. Wixforth, A. Mazuelas, J. Härtwig, and J. Baruchel, Appl. Phys. Lett. **75**, 1709 (1999).
- [79] N. Nakagiri and H. Kaizuka, Jap. J. Appl. Phys. **29**, 744 (1990).
- [80] M. Büttiker and R. Landauer, IBM. J. Res. Develop. **30**, 451 (1986).
- [81] F. Demming, K. Dickmann, and J. Jersch, Rev. Sci. Instrum. **69**, 2406 (1998).
- [82] D. Botkin, J. Glass, D. S. Chemla, D. F. Ogletree, M. Salmeron, and S. Weiss, Appl. Phys. Lett. **69**, 1321 (1996).
- [83] D. Botkin, S. Weiss, D. F. Ogletree, J. Beeman, M. Salmeron, and D. S. Chemla, Rev. Sci. Instrum. **66**, 4130 (1995).
- [84] W. Weiss, D. Botkin, D. F. Ogletree, M. Salmeron, and D. S. Chemla, phys. stat. sol. (b) **188**, 343 (1995).

- [85] T. Hesjedal, E. Chilla, and H.-J. Fröhlich, *Thin Solid Films* **264**, 264 (1995).
- [86] M. Völker, W. Krieger, and H. Walter, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 1717 (1991).
- [87] L. Arnold, W. Krieger, and H. Walther, *J. Vac. Sci. Technol. A* **6**, 466 (1988).
- [88] J. Schmidt, D. H. Rapoport, and H.-J. Fröhlich, *Rev. Sci. Instrum.* **70**, 3377 (1999).
- [89] W. Seifert, E. Gerner, M. Stachel, and K. Dransfeld, *Ultramicroscopy* **42-44**, 379 (1992).
- [90] G. P. Kochanski, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2285 (1989).
- [91] W. Rohrbeck, E. Chilla, H.-J. Fröhlich, and J. Riedel, *Appl. Phys. A* **52**, 344 (1991).
- [92] E. Chilla, W. Rohrbeck, H.-J. Fröhlich, and J. Riedel, *Acoustic Imaging* **19**, 737 (1992).
- [93] A. J. Slobodnik, E. D. Conway, and R. T. Delmonico, *Microwave Acoustic Handbook* (NTIS, Springfield VA, 1973).
- [94] G. Behme, Ph.D. thesis, Humboldt-Universität Berlin, 2000.
- [95] J. Frohn, M. Giesen, M. Poensgen, J. F. Wolf, and H. Ibach, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3543 (1991).
- [96] S. C. Meepagala, F. Real, and C. B. Reyes, *J. Vac. Sci. Technol. B* **9**, 1340 (1991).

A Beweis zum Verhalten des Minimalabstandes bei großen Abstandsmodulationen

Behauptung: Gemäß den Definitionen des Abschnitts 4.2 seien d_1 die Amplitude der Abstandsmodulation, d_{0ch} der äquivalente Tunnelabstand, d_{0cc} der mittlere Tunnelabstand im Constant-Current-Modus und $d_{min}(d_{0ch}, d_1) \stackrel{def}{=} d_{0cc}(d_{0ch}, d_1) - d_1$ der Minimalabstand. Dann gilt:

$$\lim_{d_1 \rightarrow \infty} d_{min}(d_{0ch}, d_1) = 0 \quad , \quad (A.1)$$

Beweis: Mit der Abstandsabhängigkeit des Tunnelstromes nach Simmons 4.8 läßt sich die Gleichung 4.30 zu

$$\frac{1}{d_{0ch}} e^{-2\kappa d_{0ch}} = H(d_{0cc}, d_1, 0) \frac{1}{d_{0cc}} e^{-2\kappa d_{0cc}} \quad (A.2)$$

umformen. Der Ausdruck auf der rechten Seite der Gleichung A.2 werde nun mit $D(d_{0cc}, d_1,)$ abgekürzt.

$$\begin{aligned} D(d_{0cc}, d_1,) &\stackrel{def}{=} H(d_{0cc}, d_1, 0) \frac{1}{d_{0cc}} e^{-2\kappa d_{0cc}} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \left[\binom{2m}{m} \frac{1}{2^{2m}} \sum_{\nu=0}^{2m} \frac{(2\kappa d_0)^\nu}{\nu!} \right] \left(\frac{d_1}{d_0} \right)^{2m} \frac{1}{d_{0cc}} e^{-2\kappa d_{0cc}} \end{aligned} \quad (A.3)$$

Da d_{0cc} eine Lösung der Gleichung A.2 ist, beschreibt $d_{0cc} = d_{0cc}(d_{0ch}, d_1)$ eine Kurve mit konstantem $D(d_{0cc}, d_1,)$ in der Viertelebene $\{(d_{0ch}, d_1)\}$ mit $0 < d_{0ch}$ und $0 < d_1$. Die Behauptung A.1 ist somit äquivalent zur Aussage, daß für jedes d_{0ch} die Kurve $d_{0cc} = d_{0cc}(d_{0ch}, d_1)$ mit steigendem d_1 der Winkelhalbierenden $d_{0cc} = d_1$ beliebig nahe kommt (Abb. A.1).

Da d_{0cc} eine Lösung der Gleichung A.2 ist, beschreibt $d_{0cc} = d_{0cc}(d_{0ch}, d_1)$ eine Kurve mit konstantem $D(d_{0cc}, d_1,)$ in der Viertelebene $\{(d_{0ch}, d_1)\}$ mit $0 < d_{0ch}$ und $0 < d_1$. Die Behauptung A.1 ist somit äquivalent zur Aussage, daß für jedes d_{0ch} die Kurve $d_{0cc} = d_{0cc}(d_{0ch}, d_1)$ mit steigendem d_1 der Winkelhalbierenden $d_{0cc} = d_1$ beliebig nahe kommt. Dieses Verhalten ist in der Abb. A.1 a) skizziert, in der auch das um 45° gedrehte x-y-Koordinatensystem eingezeichnet ist. Für die neuen Koordinaten gilt:

$$x = (d_{0cc} + d_1) / \sqrt{2} \quad , \quad y = (d_{0cc} - d_1) / \sqrt{2} \quad (A.4)$$

Mit einer Abschätzung, die hier nicht vorgestellt werden soll, läßt sich beweisen, daß die Summe in Gleichung A.3 für $d_{0ch} = d_1$ nicht konvergiert, sondern eine positive Polstelle hat.

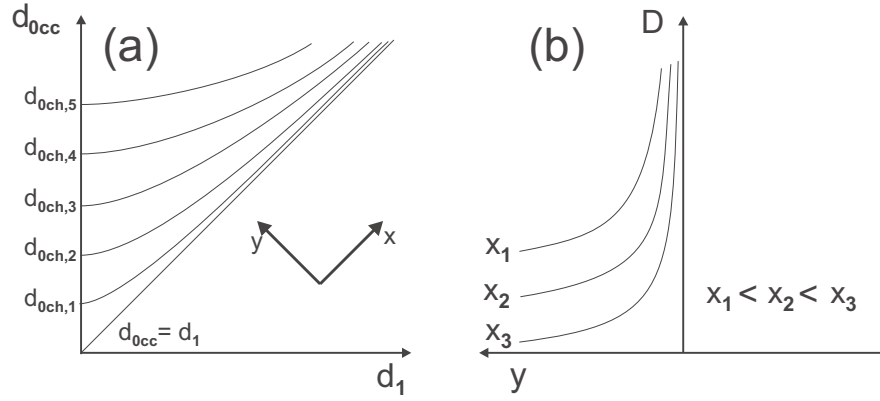


Figure A.1: Veranschaulichung der Eigenschaften der Funktion D . (a) Kurven $d_{0cc}(d_{0ch}, d_1)$ mit $D(d_{0cc}, d_1) = \text{const}$ für verschiedene d_{0ch} . Hierbei gilt: $d_{0ch,1} < d_{0ch,2} < d_{0ch,3} < d_{0ch,4} < d_{0ch,5}$. Mit steigendem d_1 kommen die Kurven der Winkelhalbierenden $d_{0cc} = d_1$ beliebig nahe. (b) D als Funktion der gedrehten Koordinate y für verschiedene Werte x_1, x_2, x_3 . Während D bei $y = 0$ eine Polstelle hat, nähert sich D für $y > 0$ mit steigendem x der y -Achse asymptotisch.

Ferner läßt sich an Gleichung A.3 erkennen, daß $D(d_{0cc}, d_1,)$ positiv ist und monoton mit steigendem d_{0cc} fällt. Um zu beweisen, daß sich mit steigendem d_1 die Linien mit konstantem $D(d_{0cc}, d_1,)$ asymptotisch der Winkelhalbierenden nähern, genügt es daher zu zeigen, daß für jedes $y > 0$ gilt:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} D\left(\frac{x+y}{\sqrt{2}}, \frac{x-y}{\sqrt{2}}\right) \quad (\text{A.5})$$

D wird nun nach oben hin abgeschätzt:

$$\begin{aligned} D\left(\frac{x+y}{\sqrt{2}}, \frac{x-y}{\sqrt{2}}\right) &= \\ &< \sum_{m=0}^{\infty} \left[\binom{2m}{m} \frac{1}{2^{2m}} \sum_{\nu=0}^{2m} \frac{(\sqrt{2}\kappa(x+y))^{\nu}}{\nu!} \right] \left(\frac{x-y}{x+y}\right)^{2m} \frac{\sqrt{2}}{x+y} e^{-\sqrt{2}\kappa x+y} \\ &< \sum_{m=0}^{\infty} \left[\binom{2m}{m} \frac{1}{2^{2m}} \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(\sqrt{2}\kappa(x+y))^{\nu}}{\nu!} \right] \left(\frac{1 - \frac{y}{x}}{1 + \frac{y}{x}}\right)^{2m} \frac{\sqrt{2}}{x+y} e^{-\sqrt{2}\kappa x+y} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \binom{2m}{m} \frac{1}{2^{2m}} \left(\frac{1 - \frac{y}{x}}{1 + \frac{y}{x}}\right)^{2m} \frac{\sqrt{2}}{x+y} \\ &< \sum_{m=0}^{\infty} \binom{2m}{m} \frac{1}{2^{2m}} \left(1 - \frac{y}{x}\right)^{2m} \frac{\sqrt{2}}{x} \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Mit der Abkürzung $\epsilon \stackrel{def}{=} y/x$ folgt:

$$D\left(\frac{x+y}{\sqrt{2}}, \frac{x-y}{\sqrt{2}}\right) = \frac{\sqrt{2}}{y} \epsilon \sum_{m=0}^{\infty} \binom{2m}{m} \frac{1}{2^{2m}} (1-\epsilon)^{2m} = \quad (\text{A.7})$$

Es genügt zu zeigen, daß die rechte Seite der Gleichung [A.7](#) für $\epsilon \rightarrow 0$ gegen Null konvergiert:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{\sqrt{2}}{y} \epsilon \sum_{m=0}^{\infty} \binom{2m}{m} \frac{1}{2^{2m}} (1-\epsilon)^{2m} \right] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[\frac{\sqrt{2}}{y} \epsilon \sum_{m=0}^{\infty} \binom{2m}{m} \frac{1}{2^{2m}} \epsilon (1-\epsilon)^{2m} \right] = 0 \quad (\text{A.8})$$

Hiermit ist die Behauptung bewiesen.

B Algorithmus zur Kalibrierung des lateralen Maßstabes unter Berücksichtigung der Drift

Die Kernidee dieses Kalibrierungsalgorithmus besteht darin, die Drift aus zwei um 90° gegeneinander gedrehte Topographie-Bilder herauszurechnen. Zur Herleitung der Auswertgleichungen muß zuerst der Zusammenhang zwischen den beim Scannen eines STM-Bildes auftretenden Koordinatensystemen diskutiert werden. Diese Koordinatensysteme und die sie verknüpfenden Gleichungen sind in Abb. B.1 dargestellt. Die Bildpunkte der Scans in Rückrichtung sind zur Vereinfachung nicht eingezeichnet; es werden nur quadratische Scans mit N^2 Bildpunkten betrachtet. Die Lage eines Bildpunktes des STM-Bildes wird durch den Index n_f (f: fast) in der schnellen und den Index n_s (s: slow) in der langsamen Scanrichtung angegeben (Abb. B.1 (a) Indexsystem). Die STM-Meßsoftware verfügt im allgemeinen über eine Standardkalibrierung für den verwendeten Scanner, die aber herstellungs- und alterungsbedingt nicht präzise die Bewegung der Spitze in Abhängigkeit der angelegten Steuerspannungen wiedergibt. Wäre diese Standardkalibrierung korrekt, so würde die Spitze die Punkte \mathbf{r}_{or} abrastern, die in einem Quadrat liegen, deren Kantenlänge die vom Experimentator eingegebene Bildlänge l_{or} ist. Das System dieser Punkte \mathbf{r}_{or} werde als "originäres System" bezeichnet. α ist dabei der in der STM-Meßsoftware einzugebende Rotationswinkel zwischen Indexsystem und originärem System. Die langsame und schnelle Scanrichtung für $\alpha = 0^\circ$ und $\alpha = 90^\circ$ sowie der numerische Zusammenhang zwischen den Index- und originären Koordinaten sind in den Abbildungen B.1 (b) bzw. (c) ersichtlich. Besteht zwischen Spitze und Probe keine Drift, dann rastert die Spitze auf der Probe ein Rechteck ab, dessen Bildpunkte \mathbf{r}_{cal} sich durch Multiplikation der Komponenten der originären Bildpunkte mit den Kalibrierungsfaktoren p_x und p_y ergeben. Diese kalibrierten Bildpunkte liefern einen rechteckigen Bildausschnitt der Kantenlängen $l_{x,cal} = p_x l_{or}$ und $l_{y,cal} = p_y l_{or}$ (Abb. B.1 (d)). Das Koordinatensystem dieser realen Positionen der Spitze bezogen auf eine driftfreie Probe oder bezogen auf das Laborsystem werde als kalibriertes System bezeichnet. Driftet die Spitze gegenüber der Probe während des Hin- und Rückscans einer Zeile um den Driftvektor $\mathbf{d}_s = (d_{sx}, d_{sy})$, dann bilden die Bildpunkte \mathbf{r}_{sam} im Koordinatensystem der Probenoberfläche ein Parallelogramm, dessen Gestalt vom Rotationswinkel α abhängt (Abb. B.1 (e) bzw. (f)). Jeder Bildpunkt \mathbf{r}_{sam} ist gegenüber seiner Lage \mathbf{r}_{cal} im kalibrierten System um einen Differenzvektor $\Delta \mathbf{r}_{drift}$ verschoben, der proportional zur seit dem Start des Scans vergangenen Zeit ist. Da die Scangeschwindigkeit in der schnellen Scanrichtung in der Regel groß gegenüber der Driftgeschwindigkeit ist, wird im folgenden die Drift während des Scans einer Zeile vernachlässigt. Den minimalen Unterschied in der Position dieser genäherten Bildpunkte im Probensystem machen die Abbildun-

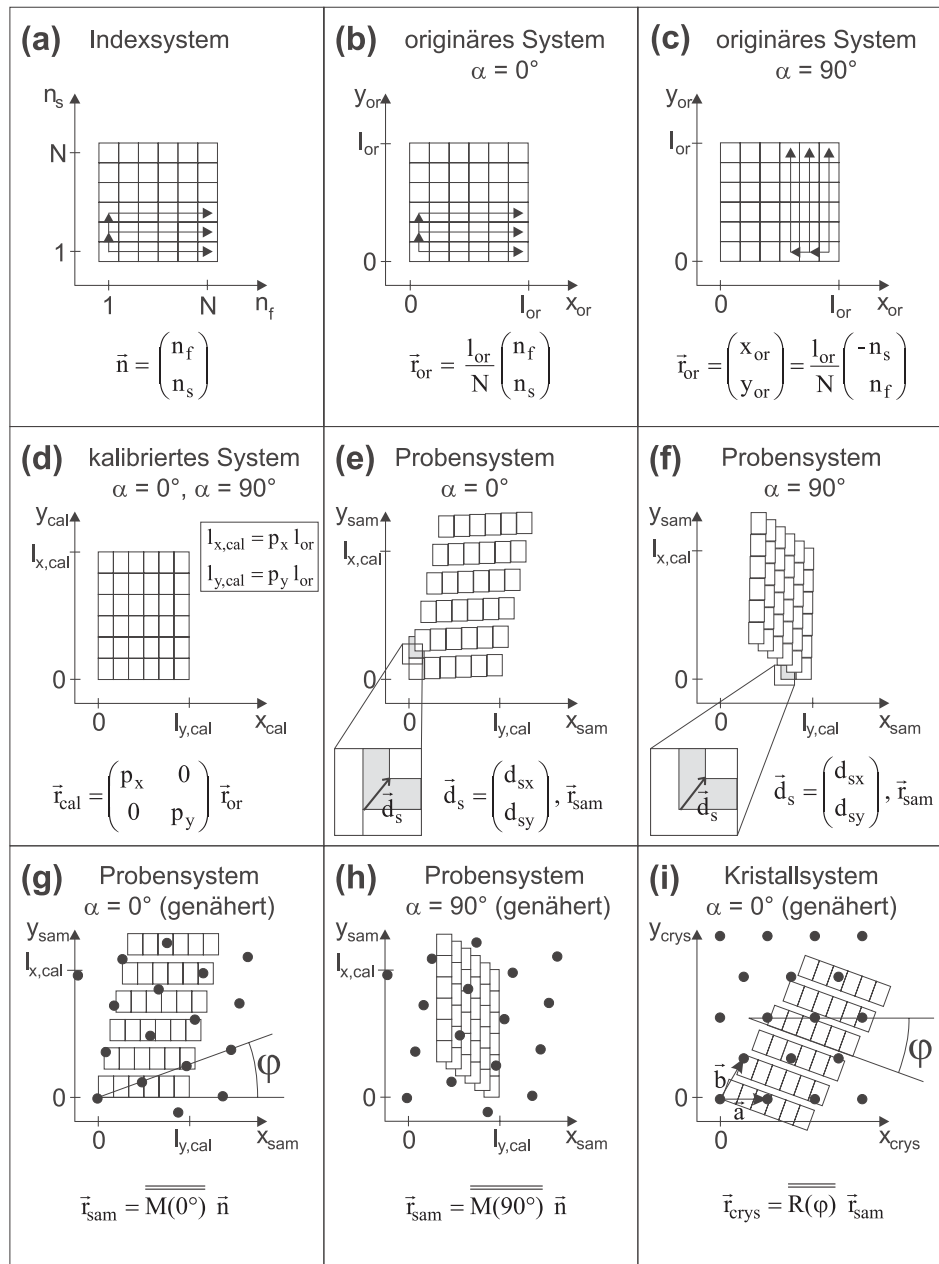


Figure B.1: Die bei der Kalibrierung des lateralen Maßstabes verwendeten Koordinatensysteme. (a) Das Indexsystem der als Falschfarbenbild dargestellten Bildpunkte des STM-Bildes. Im originären System ((b) und (c)) sind die Orte der Spitze dargestellt, die die Spitze auf einer nicht-driftenden Probe abrastern würde, wenn die Standardkalibrierung korrekt wäre. α ist dabei der Rotationswinkel des quadratischen Scanbereichs, der bei der Berechnung der Orte der Spitze mit der korrekten Kalibrierung ein Rechteck ist ((d) kalibriertes System). Im Koordinatensystem der driftenden Probe wird der Scanbereich in Abhängigkeit vom Rotationswinkel α zu einem Parallelogramm verzerrt ((e), (f) Probensystem). (g) und (h) zeigen die Orte der Bildpunkte unter Vernachlässigung der Drift innerhalb einer Zeile sowie die Gitterpunkte eines hexagonalen Gitters, das gegenüber dem Kristallsystem (i) um den Winkel φ gedreht ist.

gen B.1 (g) und (h) gegenüber (e) und (f) deutlich. Es gilt:

$$\mathbf{r}_{sam} = \mathbf{r}_{cal} + \Delta \mathbf{r}_{drift} = \begin{pmatrix} p_x & 0 \\ 0 & p_y \end{pmatrix} \mathbf{r}_{or} + n_s \mathbf{d}_s \quad (\text{B.1})$$

Mit den in Abb. B.1 aufgeführten Gleichungen läßt sich hiermit die Position der Bildpunkte im Probensystem als Matrixmultiplikation des Indexvektors \mathbf{n} darstellen:

$$\mathbf{r}_{sam} = \overline{\overline{M}}(\alpha) \mathbf{n} , \quad (\text{B.2})$$

wobei die Transformationsmatrizen für die Scanrichtungen $\alpha = 0^\circ$ und $\alpha = 90^\circ$ lauten:

$$\overline{\overline{M}}(0^\circ) = \begin{pmatrix} p_x \frac{l_{or}}{N} & d_{sx} \\ 0 & p_y \frac{l_{or}}{N} + d_{sy} \end{pmatrix} , \quad \overline{\overline{M}}(90^\circ) = \begin{pmatrix} 0 & -p_x \frac{l_{or}}{N} + d_{sx} \\ p_y \frac{l_{or}}{N} & d_{sy} \end{pmatrix} \quad (\text{B.3})$$

Die Kalibrierung des lateralen Maßstabes anhand einer bekannten Kristalloberfläche wird durch die Tatsache erschwert, daß der Rotationswinkel φ zwischen einer ausgesuchten Kristallachse des zweidimensionalen Oberflächengitters und der x-Achse des Probensystems unbekannt ist. Das Kristallsystem wird als das Koordinatensystem definiert, dessen x-Achse parallel zu der ausgesuchten Kristallachse ist. Abb. B.1 (i) zeigt am Beispiel eines hexagonalen Gitters, wie die Bildpunkte des Scans und die Gitterplätze im Kristallgitter \mathbf{r}_{crys} durch Drehung der entsprechenden Punkte des Probensystems \mathbf{r}_{sam} erzeugt werden:

$$\overline{\overline{R}}(\varphi) \mathbf{r}_{crys} = \mathbf{r}_{sam} , \quad \overline{\overline{R}}(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -\sin(\varphi) \\ \sin(\varphi) & \cos(\varphi) \end{pmatrix} , \quad (\text{B.4})$$

wobei $\overline{\overline{R}}(\varphi)$ die Drehmatrix ist.

Um den lateralen Maßstab zu kalibrieren, werden nun die Positionen der in Abb. B.1 (i) eingezeichneten Gittervektoren \mathbf{a} und \mathbf{b} in einem bei $\alpha = 0^\circ$ und $\alpha = 90^\circ$ gemessenen STM-Bild ausgewertet. Mit den Gleichungen B.2 und B.4 folgt für die Indexvektoren $\mathbf{n}_a(0^\circ)$, $\mathbf{n}_a(90^\circ)$, $\mathbf{n}_b(0^\circ)$, $\mathbf{n}_b(90^\circ)$ der bei $\alpha = 0^\circ$ bzw. $\alpha = 90^\circ$ gemessenen Punkte \mathbf{a} und \mathbf{b} des Oberflächengitters:

$$\begin{aligned} \overline{\overline{R}}(\varphi) \mathbf{a}_{crys} &= \overline{\overline{M}}(0^\circ) \mathbf{n}_a(0^\circ) & , & & \overline{\overline{R}}(\varphi) \mathbf{b}_{crys} &= \overline{\overline{M}}(0^\circ) \mathbf{n}_b(90^\circ) \\ \overline{\overline{R}}(\varphi) \mathbf{a}_{crys} &= \overline{\overline{M}}(90^\circ) \mathbf{n}_a(0^\circ) & , & & \overline{\overline{R}}(\varphi) \mathbf{b}_{crys} &= \overline{\overline{M}}(90^\circ) \mathbf{n}_b(90^\circ) \end{aligned}$$

Dieses nicht-lineare System aus acht Gleichungen hat die fünf Unbekannten p_x , p_y , d_{sx} , d_{sy} und φ und ist somit überbestimmt. Da die Komponenten der Vektoren \mathbf{a}_{crys} , \mathbf{b}_{crys} , $\mathbf{n}_a(0^\circ)$, $\mathbf{n}_a(90^\circ)$, $\mathbf{n}_b(0^\circ)$ und $\mathbf{n}_b(90^\circ)$ experimentell bestimmt worden sind, ist es daher nahezu ausgeschlossen,

daß sich das Gleichungssystem B.5 exakt lösen läßt. Daher werden die Werte der fünf Unbekannten ermittelt, die das Gleichungssystem B.5 am besten lösen. Bezeichnen \mathbf{r}_x und \mathbf{r}_y die x- bzw. die y-Komponente eines Vektors \mathbf{r} , dann ist die Funktion

$$\begin{aligned}
Q(p_x, p_y, d_{sx}, d_{sy}, \varphi) = & \left[\left(\overline{\mathbf{R}}(\varphi) \mathbf{a}_{crys} \right)_x - \left(\overline{\mathbf{M}}(0^\circ) \mathbf{n}_a(0^\circ) \right)_x \right]^2 + \left[\left(\overline{\mathbf{R}}(\varphi) \mathbf{a}_{crys} \right)_y - \left(\overline{\mathbf{M}}(0^\circ) \mathbf{n}_a(0^\circ) \right)_y \right]^2 \\
& + \left[\left(\overline{\mathbf{R}}(\varphi) \mathbf{a}_{crys} \right)_x - \left(\overline{\mathbf{M}}(90^\circ) \mathbf{n}_a(90^\circ) \right)_x \right]^2 + \left[\left(\overline{\mathbf{R}}(\varphi) \mathbf{a}_{crys} \right)_y - \left(\overline{\mathbf{M}}(90^\circ) \mathbf{n}_a(90^\circ) \right)_y \right]^2 \\
& + \left[\left(\overline{\mathbf{R}}(\varphi) \mathbf{b}_{crys} \right)_x - \left(\overline{\mathbf{M}}(0^\circ) \mathbf{n}_b(0^\circ) \right)_x \right]^2 + \left[\left(\overline{\mathbf{R}}(\varphi) \mathbf{b}_{crys} \right)_y - \left(\overline{\mathbf{M}}(0^\circ) \mathbf{n}_b(0^\circ) \right)_y \right]^2 \\
& + \left[\left(\overline{\mathbf{R}}(\varphi) \mathbf{b}_{crys} \right)_x - \left(\overline{\mathbf{M}}(90^\circ) \mathbf{n}_b(90^\circ) \right)_x \right]^2 + \left[\left(\overline{\mathbf{R}}(\varphi) \mathbf{b}_{crys} \right)_y - \left(\overline{\mathbf{M}}(90^\circ) \mathbf{n}_b(90^\circ) \right)_y \right]^2
\end{aligned} \tag{B.5}$$

ein Maß für den Fehler der Lösung $(p_x, p_y, d_{sx}, d_{sy}, \varphi)$ des Gleichungssystems B.5. Das Quintupel $(p_x, p_y, d_{sx}, d_{sy}, \varphi)_{opt}$, für das Q minimal wird, wird als optimale Lösung angesehen. Es wird numerisch mit Hilfe der Software Mathematica ermittelt.

Um eine möglichst präzise laterale Kalibrierung zu erzielen und um ihre Genauigkeit abschätzen zu können, wurden mehrere Topographiebilder mit den Scanrichtungen 0° und 90° und der Zeilenanzahl 200 aufgenommen und in 6 Paaren unterschiedlicher Scanrichtung ausgewertet. Wie im Abschnitt 5.5 erläutert, wurden die gemessenen atomaren Abstände mit Hilfe des Programmes "FFT_filtering_of_numerical_data" aus der Fouriertransformierten der Topographiebilder bestimmt. Die Ergebnisse für die Kalibrierungsfaktoren p_x und p_y sowie für die Drift $200 \times d_{sx}$ der Probe während einer Messung werden in der Tabelle 7.1 zusammengefaßt und im Abschnitt 7.1.1 diskutiert.

Lebenslauf

Name: Peter Voigt
Geburtsdatum: 4.1.1970
Geburtsort: Berlin
Familienstand: ledig

Bildungsweg

1976 – 1989 Grundschole, Gymnasium in Berlin
1988 – 1995 Physikstudium an der Freien Universität Berlin
10/1993 – 04/1995 Diplomarbeit über "'Hochauflösende photothermische Mikroskopie an Mikrostrukturen und an Inhomogenitäten in dielektrischen Systemen"'
26.07.1995 Diplomprüfung in Physik

Berufstätigkeit

07/1993 - 09/1993 Praktikum an der Royal Institution, London:
Computersimulationen zur Diffusion von Molekülen in Zeoliten
02/1996 - 03/1996 Carl Zeiss Jena:
Ingenieur in der optischen Meßtechnik
03/1996 - 11/1997 Siemens Microelectronics Center, Dresden (heute Infineon):
Bauelemente-Charakterisierung
12/1997 - 01/2002 Anfertigung der vorliegenden Dissertation am Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik in der Arbeitsgruppe Dr. R. Kochs,
Betreuung: Prof. Dr. K. H. Ploog

Selbständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, die vorliegende Dissertation "Quantitative rastertunnelmikroskopische Untersuchungen akustischer Oberflächenwellenfelder auf der Nanometerskala" selbständig und ohne unerlaubte Hilfe angefertigt zu haben.

Ich habe mich anderwärts nicht um einen Doktorgrad beworben und besitze einen entsprechenden Doktorgrad nicht.

Ich erkläre die Kenntnisnahme der dem Verfahren zugrunde liegenden Promotionsordnung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I der Humboldt-Universität zu Berlin.

Peter Voigt

6. Februar 2002